



## ESTIMATIVA DE ESTADO NO ARMAZENAMENTO TÉRMICO EM MATERIAIS DE MUDANÇA DE FASE CONTENDO NANOPARTÍCULAS

Bruno dos Reis Jaccoud

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia da Nanotecnologia, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia da Nanotecnologia.

Orientadores: Helcio Rangel Barreto Orlande  
Marcelo José Colaço

Rio de Janeiro  
Abril de 2018

ESTIMATIVA DE ESTADO NO ARMAZENAMENTO TÉRMICO EM  
MATERIAIS DE MUDANÇA DE FASE CONTENDO NANOPARTÍCULAS

Bruno dos Reis Jaccoud

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ  
COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE)  
DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS  
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR  
EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA DA NANOTECNOLOGIA.

Examinada por:

---

Prof. Helcio Rangel Barreto Orlande, Ph.D

---

Prof. Marcelo José Colaço, D.Sc.

---

Prof. Dilson Silva dos Santos, D.Sc.

---

Prof. Olivier Fudym, Ph.D.

---

Prof. Su Jian, D.Sc.

---

Prof. Solidônio Rodrigues de Carvalho, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

ABRIL DE 2018

Jaccoud, Bruno dos Reis

Estimativa de Estado no Armazenamento Térmico em Materiais de Mudança de Fase contendo nanopartículas/Bruno dos Reis Jaccoud. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2018.

XXV, 194 p.: il.; 29, 7cm.

Orientadores: Helcio Rangel Barreto Orlande

Marcelo José Colaço

Tese (doutorado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia da Nanotecnologia, 2018.

Referências Bibliográficas: p. 178 – 192.

1. Armazenamento de Energia Térmica. 2. Nanopartícula . 3. Materiais de Mudança de Fase. 4. Problemas Inversos. 5. Filtro de Partículas. 6. Problema de Estimativa de Estado. I. Orlande, Helcio Rangel Barreto *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia da Nanotecnologia. III. Título.

*“O sofrimento é passageiro; desistir é para sempre.”*  
*(Lance Armstrong)*

*À minha família porque sem ela eu jamais teria  
chegado onde cheguei.*

# Agradecimentos

Inicio meus agradecimentos a Deus, pois Ele colocou pessoas tão especiais ao meu lado, sem as quais certamente não teria dado conta.

Aos meus pais, Marcia de Cassia dos Reis Jaccoud e Edson Jaccoud, que nunca mediram quaisquer esforços para que eu pudesse estudar, e não somente isso, mas também por transformar esta vida em uma existência digna, próspera e frutífera preparando-me para o mundo.

Agradeço a minha esposa Rachel Manhães de Lucena por toda felicidade, carinho, compreensão, apoio, incentivo e dedicação, fazendo parte de cada vitória.

Às minhas irmãs Thais e Mariana, e ao meu sobrinho Bernardo, pelo carinho e apoio e por me fazerem dar valor as coisas simples da vida.

Aos meus orientadores Helcio Rangel Barreto Orlande e Marcelo José Colaço por suas valiosas contribuições acadêmicas, pelos ensinamentos, observações, orientações precisas e pela confiança depositada na execução desta tese.

A todos os professores do Programa de Engenharia da Nanotecnologia (COPPE/UFRJ), pelo apoio, disponibilidade e pelos conhecimentos transmitidos ao longo do curso do Doutorado.

Aos funcionários Evanise Silva, Júlio Ramos, Rafael Calazans, Vera Noronha, Paulo Silva, Paulo Veiga, Luciana Machado por terem dado suporte para o desenvolvimento do trabalho.

Aos professores José da Rocha Miranda Pontes, Norberto Mangiavacchi, Gustavo Rabello dos Anjos pelas palavras de apoio e pelos conselhos que em dado momento foram fundamentais para o prosseguimento desta tese.

Aos professores Benaia Sobreira de Jesus Lima e Paulo Cesar de Araújo Santos pelos ensinamentos, disposição em sempre me ouvir com interesse, paciência e dedicação ao longo desses anos.

Aos amigos e colegas que sempre ajudaram com incentivos importantes, pela troca de ideias e pelos momentos de descontração tão necessários: Camila Ribeiro de Lacerda, Cesar Cunha Pacheco, Leonardo Bermeo, Bruna Rafaella Loiola, Paula Lyra Falquetto, Bernard Lamien, José Mir Justino da Costa, Maycon Cesar Magalhães, Nilton Pereira, Mohsen Alaeian, Martim Costa, Rodrigo Basto, Marcus Curi, Henrique Massard, Masoud Ghanbari, Rafael Fiorencio, Diego Estumano, Diana

Santos, Cláudia Caldas Rodrigues Cruz, Erick Lorenzato Ferreira Vianna, Rodrigo Bezerra Vasconcelos Campos e Vlademir Vitaliano de Figueiredo.

Ao Grupo de Estudos e Simulações Ambientais em Reservatórios (GESAR/UERJ) por ceder tão gentilmente o uso do *cluster*, possibilitando a realização de algumas simulações deste estudo.

A Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo suporte financeiro que me permitiu a dedicação integral às atividades desenvolvidas durante o doutorado.

A todos os funcionários da COPPE que de alguma forma colaboraram com esta etapa que se encerra.

Agradeço a todas as pessoas que contribuíram com o desenvolvimento desta tese, tenha sido por meio de críticas, ideias, apoio, incentivo ou qualquer outra forma de auxílio.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

## ESTIMATIVA DE ESTADO NO ARMAZENAMENTO TÉRMICO EM MATERIAIS DE MUDANÇA DE FASE CONTENDO NANOPARTÍCULAS

Bruno dos Reis Jaccoud

Abril/2018

Orientadores: Helcio Rangel Barreto Orlande  
Marcelo José Colaço

Programa: Engenharia da Nanotecnologia

Neste trabalho, problemas de estimativa de estado foram resolvidos utilizando-se técnicas Bayesianas, em aplicações envolvendo o armazenamento de energia através de materiais de mudança de fase contendo nanopartículas metálicas. Situações físicas modeladas por um problema unidimensional e por um problema bidimensional foram analisadas. O modelo unidimensional foi resolvido analiticamente através da solução de Rubinstein e numericamente pelo Método dos Volumes Finitos. Para o caso bidimensional, o modelo de evolução de estado foi representado de forma discreta pelo Métodos dos Volumes Finitos. No entanto, para a redução do custo computacional associado ao problema de estimativa de estado, um modelo reduzido foi proposto com base na técnica de Decomposição Ortogonal Própria com Funções de Base Radial. Para lidar com os erros inerentes ao modelo reduzido, foi implementado o Modelo de Erro de Aproximação. O problema de estimativa de estado foi resolvido pela técnica do filtro de partículas, envolvendo modelos não lineares, com incertezas aditivas e Gaussianas, para casos com medidas transientes simuladas. O foco do trabalho foi a estimativa da energia armazenada no material de mudança de fase sob irradiância solar direta, a partir de medidas de temperatura não intrusivas. Os resultados obtidos demonstraram a robustez da abordagem utilizada, que foi capaz de prever adequadamente esta variável de estado de grande interesse prático, mesmo para grandes incertezas nos modelos de evolução de estado e de observação, assim como nas medidas experimentais.



Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

STATE ESTIMATION OF THERMAL STORAGE IN PHASE CHANGE  
MATERIALS CONTAINING NANOPARTICLES

Bruno dos Reis Jaccoud

April/2018

Advisors: Helcio Rangel Barreto Orlande  
Marcelo José Colaço

Department: Nanotechnology Engineering

This work deals with the solution of state estimation problems by using Bayesian techniques, in applications related to the energy storage in phase change materials containing metallic nanoparticles. Physical situations modelled by one-dimensional and two-dimensional problems were analyzed. The one-dimensional model was solved analytically by using Rubinstein's solution and numerically by the Finite Volume Method. For the two-dimensional case, the state evolution model was formulated in discrete form by the Finite Volume Method. However, for the reduction of the computational cost associated with the state estimation problem, a reduced model was proposed in terms of Proper Orthogonal Decomposition and Radial Basis Functions. The Approximation Error Model was implemented to deal with the inherent errors related to the reduced model. The state estimation problem was solved with the Particle Filter technique, for nonlinear models with additive and Gaussian uncertainties, for cases involving simulated transient measurements. The focus of this work was the estimation of the energy stored in the phase change material under direct solar irradiance, with nonintrusive temperature measurements. The results obtained here demonstrated the robustness of the approach used, even for large uncertainties in the evolution and observation models, as well as in the measurements.

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>xiii</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xviii</b>
<b>Lista de Símbolos</b>	<b>xx</b>
<b>Lista de Abreviaturas</b>	<b>xxv</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Objetivos . . . . .	3
1.2 Organização do Trabalho . . . . .	4
<b>2 Revisão Bibliográfica</b>	<b>5</b>
2.1 Armazenamento de Energia . . . . .	5
2.1.1 Armazenamento de Energia Térmica . . . . .	6
2.2 Mudança de fase . . . . .	9
2.3 Materiais de Mudança de Fase . . . . .	11
2.3.1 Classificação . . . . .	12
2.3.2 Problemas e Desafios . . . . .	14
2.4 Nanotecnologia na estocagem térmica de energia . . . . .	17
2.5 Métodos de Solução de Problemas Diretos de Mudança de Fase . . . . .	21
2.6 Problemas Inversos . . . . .	27
2.6.1 Inferência Bayesiana . . . . .	29
2.6.2 Estimativa em problemas de mudança de fase . . . . .	31
2.6.3 Modelo Reduzido . . . . .	32
2.7 Contribuições da Tese . . . . .	35
<b>3 Problemas Físicos e Formulações Matemáticas</b>	<b>37</b>
3.1 Problema Unidimensional . . . . .	37
3.1.1 Formulação Matemática . . . . .	38
3.1.2 Adimensionalização . . . . .	39
3.1.3 Modelo Direto de Solidificação . . . . .	40

3.1.4	Limitações do Modelo . . . . .	43
3.1.5	Formulação pelo método da entalpia . . . . .	44
3.1.6	Método dos Volumes Finitos . . . . .	45
3.2	Problema Bidimensional . . . . .	50
3.2.1	Problema Físico . . . . .	50
3.2.2	Modelo Matemático . . . . .	51
<b>4</b>	<b>Problema de estimativa de estado</b>	<b>60</b>
4.1	Problemas Inversos . . . . .	60
4.1.1	Inferência Bayesiana . . . . .	61
4.2	Problemas de Estimativa de Estado . . . . .	62
4.3	Filtros de Partículas . . . . .	65
4.3.1	Filtro de Amostragem e Reamostragem por Importância (SIR)	68
4.3.2	Filtro Auxiliar de Amostragem e Reamostragem por Importância (ASIR) . . . . .	71
4.3.3	Filtro de LIU & WEST . . . . .	72
4.4	Modelo de Erro . . . . .	76
4.4.1	Modelo de Erro Convencional . . . . .	76
4.4.2	Modelo de Erro de Aproximação . . . . .	77
4.5	Decomposição Ortogonal Própria e Funções de Base Radial . . . . .	79
4.5.1	Conceituando a Decomposição Ortogonal Própria . . . . .	80
4.5.2	Fundamentos . . . . .	81
4.5.3	Construção da base POD - Abordagem via Decomposição em Valores Singulares . . . . .	86
4.6	Procedimento POD-RBF . . . . .	89
4.7	Crime Inverso . . . . .	92
<b>5</b>	<b>Verificação das Soluções Numéricas</b>	<b>93</b>
5.1	Problema Unidimensional . . . . .	93
5.1.1	Critérios para Convergência de Malha . . . . .	93
5.1.2	Solidificação de Liga Binária . . . . .	95
5.2	Problema Bidimensional . . . . .	99
5.2.1	Verificação da Solução . . . . .	99
5.2.2	Concentração de nanopartículas . . . . .	112
5.3	Modelo Reduzido . . . . .	115
5.3.1	Solução Aproximada pelo procedimento POD-RBF . . . . .	115
<b>6</b>	<b>Resultados e Discussões</b>	<b>121</b>
6.1	Problema Unidimensional . . . . .	121
6.2	Problema Bidimensional . . . . .	144

6.2.1	Erro de Modelo . . . . .	145
6.2.2	Estimativa com Modelo de Evolução de Estado Gaussiano para o Fluxo de Calor . . . . .	149
6.2.3	Estimativa com um Modelo de Evolução de Estado de Passeio Aleatório para o Fluxo de Calor . . . . .	153
<b>7</b>	<b>Conclusões e Sugestões</b>	<b>175</b>
7.0.1	Sugestões para trabalhos futuros . . . . .	177
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>178</b>
<b>A</b>	<b>Linhas de Corrente</b>	<b>193</b>

# Lista de Figuras

2.1	Armazenamento de calor via Calor Sensível . . . . .	7
2.2	Variação da Entalpia com a Temperatura para uma substância impura	9
2.3	Estruturas morfológicas de interface e o modo de crescimento . . . . .	11
2.4	Classificação dos materiais de armazenamento de energia térmica . . .	13
2.5	Classes de materiais que podem ser utilizados como PCM e sua vari- ação de temperatura de fusão e a entalpia de fusão . . . . .	13
2.6	Esboço de PCM aprimorados na escala macro, micro e nanométrica .	16
2.7	Oscilações da solução por método de entalpia . . . . .	25
2.8	Solução por método de entalpia modificado . . . . .	26
3.1	Modelo Físico do Processo de Solidificação . . . . .	37
3.2	Diagrama de fases para um material puro . . . . .	40
3.3	Solidificação em um meio semi-infinito . . . . .	40
3.4	Volume de Controle . . . . .	46
3.5	Malha para o problema unidimensional . . . . .	46
3.6	Esquema do problema de mudança de fase sólido-líquido em uma cavidade quadrada . . . . .	50
3.7	Diagrama de mudança de fase . . . . .	53
4.1	Processo de previsão e atualização de dados em estimativa de variáveis de estado . . . . .	65
4.2	Desenho Esquemático do processo de reamostragem . . . . .	67
4.3	Desenho Esquemático do conceito do instantâneo . . . . .	82
4.4	Ilustração dos vetores não correlacionado e correlacionado . . . . .	83
4.5	Vetores correlacionados e suas projeção no original e no novo sistema de coordenadas 2D . . . . .	84
4.6	Desenho Esquemático do truncamento de $\lambda$ autovalores para o modelo reduzido . . . . .	88
5.1	Análise de convergência para a malha do modelo direto de Solidificação	96
5.2	Comparação dos perfis de temperatura e do erro absoluto em $\chi = 1, 5$ no processo de solidificação . . . . .	97

5.3	Desvio Absoluto entre as soluções numérico explícito e implícito na solidificação . . . . .	98
5.4	Fluxo de Irradiância Solar . . . . .	100
5.5	Desenho esquemático do domínio com a localização dos pontos . . . .	101
5.6	Diagrama de fases proposto . . . . .	103
5.7	Verificação da solução numérica de temperatura para diferentes volumes, 1 <sup>a</sup> Posição . . . . .	108
5.8	Verificação da solução numérica de temperatura para diferentes volumes, 2 <sup>a</sup> Posição . . . . .	109
5.9	Verificação da solução numérica de temperatura para diferentes volumes, 3 <sup>a</sup> Posição . . . . .	109
5.10	Verificação da solução numérica de temperatura para diferentes volumes, 4 <sup>a</sup> Posição . . . . .	110
5.11	Verificação da solução numérica de temperatura para diferentes volumes, 5 <sup>a</sup> Posição . . . . .	110
5.12	Verificação da solução numérica de temperatura para diferentes volumes, 6 <sup>a</sup> Posição . . . . .	111
5.13	Verificação da solução numérica da energia armazenada para diferentes volumes . . . . .	111
5.14	Distribuição de concentração e mudança de fase no tempo $t = 5h$ . .	113
5.15	Distribuição de concentração e mudança de fase no tempo $t = 7h$ . .	113
5.16	Distribuição de concentração e mudança de fase no tempo $t = 16h$ . .	114
5.17	Distribuição de concentração e mudança de fase no tempo $t = 24h$ . .	114
5.18	Truncamento dos Autovalores da estimativa por POD-RBF . . . . .	116
5.19	Comparação da solução com fluxo exato contra a estimativa de POD-RBF da distribuição de temperatura, 1 <sup>a</sup> Posição . . . . .	117
5.20	Comparação da solução com fluxo exato contra a estimativa de POD-RBF da distribuição de temperatura, 2 <sup>a</sup> Posição . . . . .	117
5.21	Comparação da solução com fluxo exato contra a estimativa de POD-RBF da distribuição de temperatura, 3 <sup>a</sup> Posição . . . . .	118
5.22	Comparação da solução com fluxo exato contra a estimativa de POD-RBF da distribuição de temperatura, 4 <sup>a</sup> Posição . . . . .	118
5.23	Comparação da solução com fluxo exato contra a estimativa de POD-RBF da distribuição de temperatura, 5 <sup>a</sup> Posição . . . . .	119
5.24	Comparação da solução com fluxo exato contra a estimativa de POD-RBF da distribuição de temperatura, 6 <sup>a</sup> Posição . . . . .	119
6.1	Histórico da Temperatura em $\chi = 1, 5$ , Caso 3 . . . . .	124
6.2	Perfil de Temperatura quando $\varsigma = 1, 74$ , Caso 3 . . . . .	125

6.3	Histórico da Concentração em $\chi = 1, 5$ , Caso 3 . . . . .	125
6.4	Perfil de Concentração quando $\varsigma = 1, 74$ , Caso 3 . . . . .	126
6.5	Movimento da Interface $\varsigma(\tau)$ , Caso 3 . . . . .	126
6.6	Histórico da Temperatura em $\chi = 1, 5$ , Caso 6 . . . . .	127
6.7	Perfil de Temperatura quando $\varsigma = 1, 74$ , Caso 6 . . . . .	128
6.8	Histórico da Concentração em $\chi = 1, 5$ , Caso 6 . . . . .	128
6.9	Perfil de Concentração quando $\varsigma = 1, 74$ , Caso 6 . . . . .	129
6.10	Movimento da Interface $\varsigma(\tau)$ , Caso 6. . . . .	129
6.11	Histórico da Temperatura em $\chi = 1, 5$ , Caso 9 . . . . .	132
6.12	Perfil de Temperatura quando $\varsigma = 1, 74$ , Caso . . . . .	132
6.13	Histórico da Concentração em $\chi = 1, 5$ , Caso 9 . . . . .	133
6.14	Perfil de Concentração quando $\varsigma = 1, 74$ , Caso 9 . . . . .	133
6.15	Movimento da Interface $\varsigma(\tau)$ , Caso 9 . . . . .	134
6.16	Histórico da Temperatura em $\chi = 1, 5$ , Caso 12 . . . . .	135
6.17	Perfil de Temperatura quando $\varsigma = 1, 74$ , Caso 12 . . . . .	135
6.18	Histórico da Concentração em $\chi = 1, 5$ , Caso 12 . . . . .	136
6.19	Perfil de Concentração quando $\varsigma = 1, 74$ , Caso 12 . . . . .	136
6.20	Movimento da Interface $\varsigma(\tau)$ , Caso 12 . . . . .	137
6.21	Histórico da Temperatura em $\chi = 1, 5$ , Caso 15 . . . . .	140
6.22	Perfil de Temperatura quando $\varsigma = 1, 74$ , Caso 15 . . . . .	140
6.23	Histórico da Concentração em $\chi = 1, 5$ , Caso 15 . . . . .	141
6.24	Perfil de Concentração quando $\varsigma = 1, 74$ , Caso 15 . . . . .	141
6.25	Movimento da Interface $\varsigma(\tau)$ , Caso 15 . . . . .	142
6.26	Estimativa de Parâmetros, Caso 15 . . . . .	143
6.27	Histogramas dos erros de temperatura e gráficos Q-Q plot na 1ª Posição	146
6.28	Histogramas dos erros de temperatura e gráficos Q-Q plot na 5ª Posição	147
6.29	Histogramas dos erros de temperatura e gráficos Q-Q plot na 6ª Posição	148
6.30	Estimativa da distribuição de temperatura, com <i>priori</i> Gaussiana, pelo filtro SIR no ponto $x = 0, 075\text{m}$ e $y = 0\text{m}$ . . . . .	150
6.31	Estimativa da distribuição de temperatura, com <i>priori</i> Gaussiana, pelo filtro SIR no ponto $x = 0, 225\text{m}$ e $y = 0\text{m}$ . . . . .	150
6.32	Estimativa da distribuição de temperatura, com <i>priori</i> Gaussiana, pelo filtro SIR no ponto $x = 0, 3\text{m}$ e $y = 0, 075\text{m}$ . . . . .	151
6.33	Estimativa da distribuição de temperatura, com <i>priori</i> Gaussiana, pelo filtro SIR no ponto $x = 0, 3\text{m}$ e $y = 0, 225\text{m}$ . . . . .	151
6.34	Estimativa da distribuição de temperatura, com <i>priori</i> Gaussiana, pelo filtro SIR no ponto $x = 0, 225\text{m}$ e $y = 0, 3\text{m}$ . . . . .	152
6.35	Estimativa da distribuição de temperatura, com <i>priori</i> Gaussiana, pelo filtro SIR no ponto $x = 0, 075\text{m}$ e $y = 0, 3\text{m}$ . . . . .	152

6.36	Histórico do fluxo de calor estimado pelo filtro SIR com <i>priori</i> Gaussiana. . . . .	153
6.37	Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto $x = 0,075\text{m}$ e $y = 0\text{m}$ . Caso 1. . . . .	155
6.38	Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto $x = 0,225\text{m}$ e $y = 0\text{m}$ . Caso 1. . . . .	155
6.39	Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto $x = 0,3\text{m}$ e $y = 0,075\text{m}$ . Caso 1. . . . .	156
6.40	Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto $x = 0,3\text{m}$ e $y = 0,225\text{m}$ . Caso 1. . . . .	156
6.41	Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto $x = 0,225\text{m}$ e $y = 0,3\text{m}$ . Caso 1. . . . .	157
6.42	Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto $x = 0,075\text{m}$ e $y = 0,3\text{m}$ . Caso 1. . . . .	157
6.43	Histórico do fluxo de calor estimado pelo filtro SIR. Caso 1. . . . .	158
6.44	Armazenamento de energia térmica estimado pelo filtro SIR. Caso 1. . . . .	158
6.45	Erro relativo da comparação entre o armazenamento de energia térmica estimado pelo filtro SIR contra os modelos completos e de evolução. Caso 1. . . . .	159
6.46	Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto $x = 0,075\text{m}$ e $y = 0\text{m}$ . Caso 2. . . . .	160
6.47	Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto $x = 0,225\text{m}$ e $y = 0\text{m}$ . Caso 2. . . . .	160
6.48	Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto $x = 0,3\text{m}$ e $y = 0,075\text{m}$ . Caso 2. . . . .	161
6.49	Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto $x = 0,3\text{m}$ e $y = 0,225\text{m}$ . Caso 2. . . . .	161
6.50	Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto $x = 0,225\text{m}$ e $y = 0,3\text{m}$ . Caso 2. . . . .	162
6.51	Estimativa da distribuição de temperatura do Modelo de Evolução de Estado de passeio aleatório, pelo filtro SIR no ponto $x = 0,075\text{m}$ e $y = 0,3\text{m}$ . Caso 2. . . . .	162
6.52	Histórico do fluxo de calor estimado pelo filtro SIR. Caso 2. . . . .	163
6.53	Armazenamento de energia térmica estimado pelo filtro SIR. Caso 2. . . . .	163
6.54	Erro relativo da comparação entre o armazenamento de energia térmica estimado pelo filtro SIR contra os modelos completos e de evolução. Caso 2. . . . .	164
6.55	Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto $x = 0,075\text{m}$ e $y = 0\text{m}$ . Caso 3. . . . .	165



6.56	Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto $x = 0,225\text{m}$ e $y = 0\text{m}$ . Caso 3. . . . .	165
6.57	Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto $x = 0,3\text{m}$ e $y = 0,075\text{m}$ . Caso 3. . . . .	166
6.58	Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto $x = 0,3\text{m}$ e $y = 0,225\text{m}$ . Caso 3. . . . .	166
6.59	Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto $x = 0,225\text{m}$ e $y = 0,3\text{m}$ . Caso 3. . . . .	167
6.60	Estimativa da distribuição de temperatura do Modelo de Evolução de Estado de passeio aleatório, pelo filtro SIR no ponto $x = 0,075\text{m}$ e $y = 0,3\text{m}$ . Caso 3. . . . .	167
6.61	Histórico do fluxo de calor estimado pelo filtro SIR. Caso 3. . . . .	168
6.62	Armazenamento de energia térmica estimado pelo filtro SIR. Caso 3. . . . .	168
6.63	Erro relativo da comparação entre o armazenamento de energia térmica estimado pelo filtro SIR contra os modelos completos e de evolução. Caso 3. . . . .	169
6.64	Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto $x = 0,075\text{m}$ e $y = 0\text{m}$ . Caso 4. . . . .	170
6.65	Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto $x = 0,225\text{m}$ e $y = 0\text{m}$ . Caso 4. . . . .	170
6.66	Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto $x = 0,3\text{m}$ e $y = 0,075\text{m}$ . Caso 4. . . . .	171
6.67	Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto $x = 0,3\text{m}$ e $y = 0,225\text{m}$ . Caso 4. . . . .	171
6.68	Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto $x = 0,225\text{m}$ e $y = 0,3\text{m}$ . Caso 4. . . . .	172
6.69	Estimativa da distribuição de temperatura do Modelo de Evolução de Estado de passeio aleatório, pelo filtro SIR no ponto $x = 0,075\text{m}$ e $y = 0,3\text{m}$ . Caso 4. . . . .	172
6.70	Histórico do fluxo de calor estimado pelo filtro SIR. Caso 4. . . . .	173
6.71	Armazenamento de energia térmica estimado pelo filtro SIR. Caso 4. . . . .	173
6.72	Erro relativo da comparação entre o armazenamento de energia térmica estimado pelo filtro SIR contra os modelos completos e de evolução. Caso 4. . . . .	174
A.1	Mudança de Fase e linhas de corrente em $t = 5\text{h}$ . . . . .	193
A.2	Mudança de Fase e linhas de corrente em $t = 7\text{h}$ . . . . .	193
A.3	Mudança de Fase e linhas de corrente em $t = 16\text{h}$ . . . . .	194
A.4	Mudança de Fase e linhas de corrente em $t = 24\text{h}$ . . . . .	194

# Lista de Tabelas

2.1	Vantagens e Limitações no armazenamento por calor sensível . . . . .	8
2.2	Vantagens e Limitações no armazenamento por calor latente . . . . .	9
2.3	Características importantes dos materiais para armazenamento de energia . . . . .	12
2.4	Comparação entre materiais orgânicos e inorgânicos para armazenamento de calor . . . . .	14
3.1	Coeficientes para os termos fontes na equação de Concentração . . . . .	55
3.2	Propriedades térmicas e fração mássica na equação de Energia . . . . .	57
3.3	Variáveis dependentes e parâmetros das equações de conservação . . . . .	59
4.1	Descrição das etapas do Filtro de Partículas SIR . . . . .	70
4.2	Descrição das etapas do Filtro de Partículas ASIR . . . . .	71
4.3	Descrição das etapas do Filtro de Partículas LIU & WEST . . . . .	74
5.1	Algoritmo para o Critério de Convergência de Malha . . . . .	94
5.2	Posições dos pontos em análise . . . . .	101
5.3	Propriedades termofísicas da mistura NePCM . . . . .	102
5.4	Parâmetros para a Verificação da Solução . . . . .	105
5.5	Descrição das etapas para o procedimento da estimativa do erro de discretização . . . . .	106
5.6	Valores de ICM mínimos, máximos e médio entre as malhas para a temperatura . . . . .	107
5.7	Valores de ICM mínimos, máximos e médio entre as malhas para a energia armazenada . . . . .	107
6.1	RMS da Estimativa de Estado com Medida de Temperatura . . . . .	123
6.2	RMS da Estimativa de Estado com Medida do Movimento da Interface	131
6.3	RMS da Estimativa com medida simultânea de Temperatura e Posição da Interface . . . . .	139
6.4	Parâmetros Exatos e Estimados, Caso 15 . . . . .	142

6.5	Procedimento para estimativa da variável de estado com o uso do modelo reduzido gerado através da técnica POD-RBF. . . . .	144
6.6	Casos teste para o Modelo de Evolução de Estado de passeio aleatório.	154

# Lista de Símbolos

Símbolo	Descrição	Unidade
$a$	coluna da matriz de amplitudes $\mathbf{A}$	—
$\bar{\mathbf{a}}$	vetor de amplitudes da matriz truncada	—
$\hat{A}$	Fator de redução	—
$\mathbf{A}$	Matriz de amplitudes	—
$\bar{\mathbf{A}}$	Matriz de amplitudes truncada	—
Al	Alumínio	—
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Óxido de alumínio	—
$\mathbf{B}$	Matriz de coeficientes	—
$c$	Fator de forma	—
$c_p$	Calor específico	J/kg·K
$\mathcal{C}_p$	Calor específico normalizado	—
$C$	Concentração	wt%
$C_0$	Concentração inicial	wt%
$\mathbf{C}$	Matriz de correlação	—
C	Carbono	—
Cu	Cobre	—
CuO	Óxido de cobre	—
$dp$	Diâmetro da nanopartícula	m
$D$	Difusividade Mássica	m <sup>2</sup> /s
$\mathbf{D}$	Matriz de correlação modificada	—
$\mathcal{D}$	Difusividade Mássica normalizada	—
$\mathfrak{D}$	Número de medições	—
$\tilde{e}$	Função espaçamento de malha	—
$\mathbf{f}$	Função não-linear de variáveis de estado	—
$f$	Fração mássica	—
$\tilde{f}_r$	Fator de refinamento da malha	—
$F$	Força de corpo externa, equações de momentum	—
$\mathcal{F}$	Termo fonte	—
$g$	Fração do volume de uma região representativa	—
$h$	Entalpia específica	J/kg
$\tilde{h}$	Fator de suavização	—
$\mathbf{h}$	Função não-linear de variáveis de observação	—
$H$	Entalpia	J
$\mathcal{H}$	Entalpia adimensional	—
$I$	número de instantâneos	—

Símbolo	Descrição	Unidade
<b>I</b>	Matriz Identidade	—
<i>IC</i>	Intervalo de credibilidade	—
<i>k</i>	Condutividade Térmica	W/m·K
<b>k</b>	Vetor de parâmetros das funções de base radial	—
<i>k<sub>B</sub></i>	Constante de Boltzmann	m <sup>2</sup> kg/s <sup>2</sup> · K
<i>K</i>	Número de vetores base da base DOP truncada	—
<i>l</i>	Comprimento longitudinal da placa	m
<i>L</i>	Calor Latente	J/kg
<i>L</i> <sup>2</sup>	Norma 2	—
$\mathcal{L}$	Calor Latente adimensional	—
<i>Le</i>	Número de Lewis	—
<i>m</i>	Declive assumido pela reta de líquido	K
<b>m</b>	Modificação dos parâmetros	—
<i>M</i>	número de valores amostrados de um campo	—
$\mathcal{M}$	Número de medidas de variáveis de estado	—
<i>N</i>	Distribuição Normal	—
<i>N</i>	Número de partículas	—
O <sub>2</sub>	Oxigênio	—
<i>p</i>	Função de interpolação	—
p	Retardo fixo	—
$\check{p}$	Ordem de precisão do esquema numérico	—
<i>P</i>	Pressão	Pa
$\hat{P}$	Operador linear	—
<b>P</b>	Matriz das funções de interpolação	—
$\dot{q}$	Fluxo de calor	W/m <sup>2</sup>
<i>q</i>	Densidade de importância	—
$\tilde{r}$	Valor mínimo entre número de instantâneos e amostras	—
<i>s(t)</i>	frente de mudança de fase	m
$\check{s}$	Função sinal	—
<b>s</b>	coluna da matriz dos instantâneos <b>S</b>	—
<b>S</b>	Matriz de Instantâneos	—
<i>S</i>	Função de funções de base e amplitudes	—
<i>St</i>	Número de Stefan	—
<i>t</i>	Tempo	s
<i>T</i>	Temperatura	K
<i>T</i> <sub>0</sub>	Temperatura inicial	K
<i>T<sub>equ</sub></i>	Temperatura de equilíbrio	K
<i>T<sub>eut</sub></i>	Temperatura de eutética	K
<i>T<sub>f</sub></i>	Temperatura final	K
<i>T<sub>f</sub></i>	Temperatura de referência	K
<i>T<sub>m</sub></i>	Temperatura de mudança de fase	K
<i>T<sub>sur</sub></i>	Temperatura da superfície	K
U	Distribuição Uniforme	—
<b>u</b>	Vetor velocidade	—
<i>v</i>	Número total de volumes das simulações	—
$\hat{v}$	Vetor de incertezas do modelo de observação	—

Símbolo	Descrição	Unidade
$\bar{\boldsymbol{\theta}}$	Média do vetor de incertezas do modelo de observação	—
$\mathbf{V}$	Matriz de vetores singulares à direita	—
$\widetilde{\mathbf{V}}$	Aproximação da variância dos parâmetros	—
$\mathcal{V}$	Variável de estado	—
Var	Variância	—
w	Pesos das partículas	—
$\mathbf{W}$	Matriz de covariância	—
$\mathbf{W}_{\boldsymbol{\theta}}$	Matriz de covariância do erro de aproximação do modelo de evolução	—
$\mathbf{W}_{\boldsymbol{\theta}}$	Matriz de covariância do erro de aproximação do modelo de observação	—
$\mathbf{W}_{\nu}$	Matriz de covariância da soma dos erros de aproximação	—
$x$	Variável independente espacial horizontal	m
$\bar{x}$	Média do vetor de estados	—
$\mathbf{x}$	Vetor de estados do sistema	—
$y$	Variável independente espacial vertical	m
$\mathbf{y}$	Vetor de incertezas das variáveis de estado	—
$\mathbf{z}$	Vetor de observações	—
ZnO	Óxido de zinco	—

## Símbolos Gregos

Símbolo	Descrição	Unidade
$\alpha$	Difusividade térmica normalizada	—
$\alpha^*$	Difusividade térmica	m <sup>2</sup> /s
$\boldsymbol{\alpha}$	Média da densidade normal multivariada	—
$\beta_T$	Coefficiente de expansão térmica	1/K
$\beta_S$	Coefficiente de expansão de soluto	—
$\chi$	Variável independente espacial adimensional	—
$\delta$	Fator de redução	—
$\delta^k$	Delta de Kronecker	—
$\delta^d$	Delta de Dirac	—
$\Delta A$	Área do meio de interesse	m <sup>2</sup>
$\Delta E$	Energia armazenada	J
$\Delta \Theta$	Variação de temperatura	K
$\Delta t$	Passo no tempo	—
$\Delta J$	Volume controle de interesse	—
$\Delta V$	Volume do meio de interesse	m <sup>3</sup>
$\Delta \chi$	Espaçamento entre volumes na direção $\chi$	—
$\tilde{\epsilon}$	Erro relativo	—
$\epsilon_{\text{RMS}}$	Erro RMS	—
$\bar{\epsilon}_{\text{RMS}}$	Média dos erros RMS	—
$\epsilon$	Erro de aproximação do modelo de evolução	—

Símbolo	Descrição	Unidade
$\gamma$	Fração volumétrica	—
$\Gamma$	Coeficiente de difusão	—
$\mathbf{\Lambda}$	Matriz de vetores singulares à esquerda	—
$\kappa$	Coeficiente de segregação	—
$\lambda$	Número adimensional para solução de Stefan	—
$\mathcal{U}_{ij}$	Diferença entre solução $i$ e $j$	—
$\mu$	Viscosidade	kg/m·s
$\nu$	Soma dos erros de aproximação	—
$\bar{\nu}$	Média dos erros de aproximação	—
$\Omega$	Domínio de interesse	—
$\pi(a b)$	Probabilidade condicional de a quando ocorre b	—
$\phi$	Concentração normalizada por $C_0$	—
$\varphi$	Escalar que representa a quantidade a ser conservada	—
$\psi$	Função de base	—
$\Psi$	Matriz de funções base	—
$\bar{\Psi}$	Matriz de funções base truncada	—
$\rho$	Massa específica	kg/m <sup>3</sup>
$\sigma$	Desvio padrão e valores singulares	—
$\sigma_{\text{RMS}}$	Desvio padrão do Erro RMS	—
$\sigma_T$	Desvio padrão da temperatura	—
$\sigma_{\dot{q}}$	Desvio padrão do fluxo de calor	—
$\tau$	Tempo adimensional	—
$\bar{\theta}$	Média dos parâmetros	—
$\vartheta$	Erro de aproximação do modelo de observação	—
$\Theta$	Temperatura adimensional	—
$v$	Potencial de solução	—
$\varsigma$	Localização da interface adimensional	—
$\xi$	Tolerância estipulada	—
$\Xi$	Variável de importância	—

## Sobrescritos e Subscritos

Símbolo	Descrição	Unidade
+	Propriedade pela regra da mistura entre fases	—
0	Avaliação no passo anterior do tempo	—
e	Interface entre os volumes P e E	—
<i>ef</i>	Efetivo	—
<i>equ</i>	Equilíbrio	—
<i>est</i>	Estimado	—
<i>exa</i>	Exata	—
E	Centro do volume localizado ao leste do volume P	—
<i>f</i>	Fração de líquido	—
<i>i</i>	Posição ao longo do eixo $x$ de um volume na malha	—
<i>l</i>	Fase líquida	—

Símbolo	Descrição	Unidade
<i>max</i>	Máximo	—
<i>mb</i>	Material base	—
<i>med</i>	Medidas	—
<i>min</i>	Mínimo	—
<i>mn</i>	Material de mudança de fase nanoestruturado	—
<i>n</i>	Número de passos dados	—
P	Centro de um volume da malha	—
<i>r</i>	Indicação do modelo reduzido	—
<i>ref</i>	Referência	—
<i>s</i>	Fase sólida	—
<i>sl</i>	Zona de mistura	—
<i>sur</i>	Superfície	—
w	Interface entre os volumes P e E	—
W	Centro do volume localizado ao leste do volume P	—



# Lista de Abreviaturas

Abreviatura	Significado
AEM	Modelo de Erro de Aproximação
AET	Armazenamento de Energia Térmica
ASIR	Filtro de Amostragem e Reamostragem por Importância Auxiliar
ASME	<i>American Society of Mechanical Engineers</i>
BP	<i>British Petroleum</i>
CPs	Componentes Principais
DGESDD	Rotina da biblioteca LAPACK para o cálculo da DVS
DKL	Decomposição Karhunen-Loève
DOP	Decomposição Ortogonal Própria
ER	Extrapolação de Richardson
fdp	Função Densidade de Probabilidade
GMRES	Gerador de Mínimos Residuais
ICM	Índice de Convergência de Malha
LAPACK	<i>Linear Algebra Package</i>
MBIC	Método de Balanço Integral de Calor
MCE	Modelo Completo de Erro
MCMC	Técnica de Monte Carlo com Cadeia de Markov
MIV	Método de iteração variacional
MME	Modelo de Melhorado de Erro
MVF	Método dos Volumes Finitos
NePCM	Material de Mudança de Fase nanoestruturado
NTC	Nanotubo de carbono
Q-Q plot	Gráfico Quantil-Quantil para variáveis Normais
RMS	<i>Root mean square</i>
SIR	Filtro de Amostragem e Reamostragem por Importância
SIS	Filtro de amostragem por importância sequencial
PCA	Análise de Componentes Principais
PCM	Material de Mudança de Fase
RBF	Função de Base Radial
SVD	Decomposição em Valores Singulares

# Capítulo 1

## Introdução

A crescente demanda por energia causada pelo rápido crescimento das economias emergentes, torna o seu fornecimento e oferta um dos desafios que a sociedade moderna tem que enfrentar. Fontes de energia do tipo fósseis ainda estão amplamente disponíveis nos dias de hoje. Entretanto, estas fontes apresentam questões mais perigosas de poluição ambiental e são apontadas como um dos grandes causadores do aquecimento global.

O crescimento exponencial da população da Terra e o consequente aumento da demanda de energia, além de questões ambientais e de poluição que caracterizaram as últimas décadas, levaram grande parte da comunidade científica a concentrar seus esforços na pesquisa de formas mais eficientes de exploração de fontes renováveis, bem como na substituição gradual do uso das do tipo fósseis. Segundo dados do relatório anual da *British Petroleum* (BP) [1], no ano de 2016 85,5% da energia consumida no mundo foi do tipo fóssil, contra 3,6% do tipo renovável.

Em resposta a este desafio, a busca de fontes alternativas de energia renováveis tem se intensificado com o intuito de substituir os recursos energéticos convencionais [2, 3]. No entanto, devido ao fornecimento imprevisível dessas fontes renováveis, seu armazenamento é um dos principais obstáculos para uma implementação prática de tais fontes, dificultando uma maior adoção de fontes renováveis de energia. A capacidade de armazenar energia e liberá-la sob demanda, portanto, desempenha um papel crucial na possibilidade de explorar as energias renováveis.

Uma das fontes renováveis é a energia solar. O uso desta fonte, quando disponível, necessita de unidades de armazenamento de energia térmica, que irão armazenar energia durante o dia e possibilitar seu uso no período noturno. Ainda referente aos dados da BP, 43,8% da energia solar consumida no mundo é pelo continente Asiático, enquanto que em termos globais, o Brasil possui a marca de 0,02%, sendo o 4º país da América Latina em termos de consumo.

A nanotecnologia oferece uma extensa gama de recursos para resolver os problemas relacionados com a energia, como o desenvolvimento de componentes e apare-

lhos na ordem de 100nm, que fornecem novas maneiras de capturar, armazenar e transferir energia [4].

Desta maneira, a nanotecnologia acaba se tornando uma ferramenta poderosa para o armazenamento e uso da energia solar de diversas maneiras, como por exemplo: na adaptação da interação da luz com materiais, permitindo o processamento de semicondutores de baixo custo em dispositivos que usam a energia fotovoltaica; fabricando fotocatalisadores mais eficientes para converter a luz solar em combustíveis químicos; desenvolvendo novos materiais e membranas para as separações necessárias em muitas aplicações energéticas; convertendo combustíveis químicos em energia elétrica (e vice-versa); melhorando a energia e densidade de energia em baterias; etc [4].

Em problemas inversos, métodos determinísticos que são baseados na minimização da norma de mínimos quadrados, levam a uma estimativa pontual, sem considerar a natureza estatística das incertezas, e sem quantificar as incertezas na solução inversa. Por outro lado, técnicas baseadas na inferência Bayesiana fornecem a solução do problema inverso formulando uma descrição probabilística completa dos parâmetros desconhecidos e das incertezas associadas, dados os valores experimentais das medidas.

Os problemas de estimativa de estado também são conhecidos como problemas inversos não estacionários, sendo de grande interesse em inúmeras aplicações práticas com o objetivo de produzir estimativas sequenciais das variáveis desejadas, utilizando modelos estocásticos e medidas experimentais. Isso é realizado de maneira que o erro seja estatisticamente minimizado [5]. Os problemas de estimativa de estado podem ser resolvidos com os chamados filtros Bayesianos.

Na abordagem Bayesiana, uma tentativa é realizada com o intuito de se utilizar todas as informações disponíveis, a fim de reduzir a incerteza presente em um problema de inferência ou decisão. Novas informações obtidas são combinadas com as informações anteriores para formar a base para procedimentos estatísticos. O mecanismo formal utilizado para combinar a nova informação com a informação anteriormente disponível é conhecido como Teorema de Bayes.

O filtro Bayesiano mais conhecido é o filtro de Kalman, no entanto, a aplicação desse tipo de filtro é limitada aos modelos lineares com ruídos aditivos e Gaussianos. Nas últimas décadas, para superar essa dificuldade, técnicas baseadas no modelo de Monte Carlo foram desenvolvidas, em especial, as técnicas de filtros de partículas, aplicáveis a problemas não lineares ou com erros não Gaussianos [5–11].

## 1.1 Objetivos

O objetivo deste trabalho é a aplicação das técnicas Bayesianas, em especial os filtros de partículas, para a estimativa de variáveis de estado, em problemas de armazenamento térmico, com a adição de nanopartículas no material de mudança de fase. Este trabalho pode ser dividido em duas partes: na primeira, busca-se utilizar um modelo unidimensional de solidificação de um material de mudança de fase, contendo de nanopartículas, apresentando a aplicação das técnicas dos filtros de partículas a esse tipo de problema para a predição das variáveis de estado, temperatura, concentração e movimento de interface de mudança de fase. Na segunda parte, aplica-se, a técnica do filtro de partícula ao problema de armazenamento de energia térmica em uma cavidade quadrada envolvendo a convecção natural laminar de um fluido Newtoniano incompressível com propriedades térmicas constantes, como uma maneira de estimar o fluxo de calor, aqui denominado de irradiância solar, e prever o armazenamento de energia térmica no meio de estudo.

Umas das principais contribuições deste trabalho é o desenvolvimento de ferramentas que possibilitem a aplicação de nanocompósitos em materiais de mudança de fase como um meio de armazenamento de energia térmica, previsão da fração de sólido e controle da energia armazenada/liberada.

Buscando armazenar a maior quantidade de energia, da maneira mais eficiente, foi decidido adotar o método de armazenamento térmico latente. Materiais adequados para realizar esta tarefa são os Materiais de Mudança de Fase (PCM), capazes de coletar e liberar uma grande quantidade de energia durante o processo de fusão e solidificação a uma temperatura que pode ser útil para atividades antrópicas, como aquecimento e refrigeração do ar, produção de água quente doméstica, processos industriais e produção de energia.

Os filtros de partículas utilizados neste trabalho são nomeadamente: O filtro de Amostragem e Reamostragem por Importância (SIR), que é derivado do algoritmo Amostragem por Importância Sequencial (SIS); O filtro Auxiliar de Amostragem e Reamostragem por Importância (ASIR), que é uma extensão do filtro SIR; O filtro de LIU e WEST [12], que diferentemente dos filtros SIR e ASIR, nos quais os parâmetros não-dinâmicos são assumidos deterministicamente conhecidos, assume que estes são estocásticos e são estimados simultaneamente com as variáveis de estado. O filtro de LIU & WEST é uma extensão dos filtros SIR e ASIR e é de interesse prático, já que ele permite tratar explicitamente as incertezas presentes nos parâmetros, que aqui foram considerados como sendo os parâmetros adimensionais: números de Lewis e de Stefan, calor específico normalizado, difusividade térmica normalizada, coeficiente de segregação e difusividade mássica normalizada.

## 1.2 Organização do Trabalho

O Capítulo 2 apresenta uma breve revisão bibliográfica dos principais assuntos tratados neste trabalho.

O Capítulo 3 apresenta os problemas físicos estudados e seus respectivos modelos matemáticos (unidimensional e bidimensional). Também são introduzidas as ferramentas utilizadas na solução dos problemas diretos, a formulação pelo Método da Entalpia e do Método dos Volumes Finitos em conjunto com alguns aspectos considerados relevantes, como o esquema de discretização.

No Capítulo 4 descreve-se a metodologia utilizada para resolver o problema inverso. Neste capítulo é apresentada a formulação da técnica Bayesiana dos filtros de partículas. Também são apresentados o conceito básico do Modelo de Erro de Aproximação (AEM) e o Procedimento da Decomposição Ortogonal Própria (POD) com o auxílio das Funções de Base Radial (RBF), que será utilizado como o Modelo Reduzido (MR), em contraponto ao Modelo Completo (MC) apresentado no Capítulo 3.

O Capítulo 5 apresenta a verificação dos códigos computacionais utilizados nesta tese. Os códigos desenvolvidos para o problema direto unidimensional foram verificados através de soluções analíticas. Já o código do problema direto bidimensional foi verificado com os procedimentos relatados em ASME [13] e, por fim, o Modelo Reduzido será verificado contra a solução do Modelo Completo.

No Capítulo 6 são apresentados os resultados de estimativa de temperatura, energia armazenada e movimento de interface com os filtros Bayesianos, para os processos unidimensionais estudados neste trabalho. Finalizando este capítulo, serão apresentados os resultados referentes aos casos aplicados ao modelo bidimensional.

Por fim, as conclusões finais e as propostas para trabalhos futuros são apresentadas no Capítulo 7.

# Capítulo 2

## Revisão Bibliográfica

Este capítulo apresenta a revisão bibliográfica que norteou o presente trabalho. A mesma se dedica à questão de armazenamento de energia térmica, aos materiais e aos problemas de mudança de fase, à nanotecnologia para armazenamento energético e às técnicas de problemas inversos, em especial as técnicas de filtro de partículas.

### 2.1 Armazenamento de Energia

O armazenamento de energia é um desafio que é facilmente aplicado a todas as áreas da ciência e da tecnologia, porque desempenha um papel significativo se a energia é necessária na forma química, calor, mecânica, elétrica ou potencial.

A motivação para este papel estratégico é que a sua oferta, seja ela oriunda da terra ou do sol, nunca é uma constante. Sabe-se que a captação da energia solar só ocorre de dia, na captação eólica é necessário que se tenha uma corrente de vento a uma determinada velocidade mínima, os campos de petróleo acabam por secar, e o calor geotérmico da crosta da terra, embora aparentemente constante, acabará por diminuir.

Outra questão é a capacidade de explorar a energia quando esta não está prontamente disponível. Por exemplo, no caso de painéis solares térmicos, onde a radiação solar é convertida em calor durante o dia, há a necessidade de armazenar o excedente de energia usando dispositivos, como aquecedores solares, que são capazes de armazenar os excedentes de energia e devolver aos usuários sob demanda.

Em todo o mundo, há um crescente interesse na energia solar térmica como fonte abundante, barata, efetiva e limpa de energia. No entanto, a ausência da luz do sol, ou a escassez em um dia nublado, é fator limitante para o fornecimento de energia contínua usando energia solar térmica. Nesse contexto, os cientistas estão procurando alguma maneira de armazenar essa vasta quantidade de energia para utilizá-la na ausência de luz solar. Caso possível, isto pode ser a solução de

problemas atuais, como o esgotamento dos combustíveis fósseis explorados em alta taxa e os impactos ambientais associados ao aquecimento global

A capacidade de armazenar energia térmica de forma eficiente e econômica é um desafio, que pesquisadores e cientistas enfrentam, com o objetivo principal de converter um ciclo típico alternativo de abastecimento de energia renovável (como o ciclo solar) em um ciclo constante de abastecimento. A oportunidade de armazenar energia térmica derivada de uma fonte renovável durante o dia, e usá-la durante a noite é um dos pontos de interesse dessa pesquisa.

### 2.1.1 Armazenamento de Energia Térmica

O Armazenamento de Energia Térmica (AET) é um meio de armazenamento de energia, onde se é possível recuperar a energia armazenada e utilizá-la após algum tempo. Essa energia pode ser então armazenada utilizando dois métodos [14, 15].

- processos termoquímicos;
- processos termofísicos.

#### Processo Termoquímico

Um processo termoquímico é uma reação que ocorre quando existe uma diferença de entalpia entre os reagentes e os produtos, também é conhecida como calor de reação. Consideremos, por exemplo, uma reação de decomposição como:



Se os produtos A e B podem ser armazenados separadamente, as perdas térmicas são restritas e a reação pode ser revertida, então A e B são adequados para o armazenamento termoquímico.  $\Delta E$  representa a energia armazenada [J]

#### Processo Termofísico

Um processo termofísico é um processo que não envolve o estado químico do material, mas considera suas variáveis termofísicas, em particular sua temperatura e seu “estado” (sólido/líquido/gasoso). Processos termofísicos envolvidos no armazenamento de energia podem explorar dois tipos de “calor”: o calor sensível e o calor latente.

O uso do *calor sensível* como forma de armazenar energia é a forma mais comum e usada em aplicações tecnológicas (por exemplo, aquecedor doméstico e tanque de água para produção de água quente doméstica). Tal processo consiste em uma transferência de calor externa para um meio de armazenamento (por exemplo, água,

sais de nitrato, óleo, etc.), o que leva a um aumento de temperatura do próprio meio de armazenamento.

A quantidade de energia armazenada pelo meio de armazenamento é:

$$\Delta E = \rho \Delta V c_p (T_f - T_0) \quad (2.2)$$

onde  $\Delta E$  é a energia armazenada [J],  $\rho$  é a massa específica [kg/m<sup>3</sup>],  $\Delta V$  é o volume do meio de armazenamento [m<sup>3</sup>],  $c_p$  é o calor específico [J/kg·K],  $T_f$  é a temperatura final [K] e  $T_0$  é a temperatura inicial [K].

A partir da Eq. (2.2) é possível observar que a energia armazenada depende diretamente da variação de temperatura, do volume e das propriedades termofísicas do meio, que são a massa específica e o calor específico. É possível, portanto, aumentar a capacidade de armazenamento aumentando um desses parâmetros. Na Fig. 2.1 pode-se observar essa relação linear.

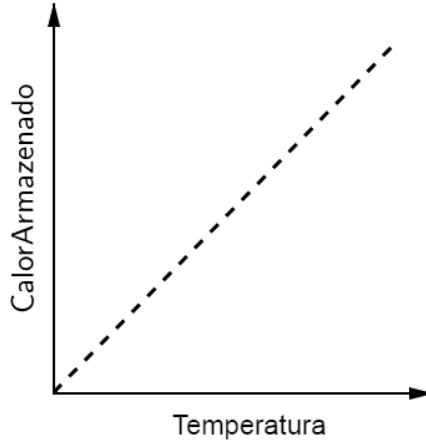


Figura 2.1: Armazenamento de calor via Calor Sensível. Adaptado de MEHLING e CABEZA [15]

A Tab. 2.1 apresenta as vantagens e desvantagens do armazenamento por calor sensível.



Tabela 2.1: Vantagens e Desvantagens no armazenamento por calor sensível [15].

Vantagens	Limitações
<ul style="list-style-type: none"> <li>– O meio de AET e o fluido utilizado são frequentemente o mesmo material, como em caldeiras para produção de água quente;</li> <li>– O fluido de AET geralmente é barato e comercialmente disponível (água, glicol, óleo mineral);</li> <li>– Esta técnica não envolve grande variação de volume ou mudanças de fase, não havendo problemas relacionados com aumento de pressão e, portanto, geralmente, o projeto de dispositivos que exploram essa técnica de armazenamento é simples;</li> <li>– Os meios de AET são quimicamente estáveis, não tóxicos e as propriedades químicas e físicas são bem conhecidas;</li> <li>– Técnicas e materiais (fluidos) geralmente são confiáveis.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>– A necessidade de aumentar a capacidade de armazenamento, leva ao aumento do tamanho do dispositivo, altera o meio de armazenamento, ou até mesmo no aumento do incremento de temperatura;</li> <li>– Essas soluções podem levar a incompatibilidades com restrições tecnológicas (por exemplo, espaço onde colocar o dispositivo, temperatura de trabalho máxima, dentre outras)</li> <li>– Não é muito eficiente em termos de relação entre energia armazenada e massa do meio de armazenamento, sendo usados pequenos incrementos de temperatura.</li> </ul>

A outra maneira citada para o AET consiste em explorar o *calor latente* dos meios de armazenamento. Quando um material na fase sólida é aquecido, ele começa a aumentar sua temperatura, até atingir a “temperatura de fusão”. Neste ponto, a energia que recebe é usada para quebrar as ligações intermoleculares, e o material de armazenamento passa do estado sólido para o estado líquido. A temperatura, teoricamente, não se eleva até que todo o material funda. A quantidade de energia, usada para conduzir o meio de armazenamento do estado sólido para o líquido, é chamada de calor latente. Naturalmente, o procedimento e o comportamento do processo são os mesmos quando um líquido esfria até o ponto em que ele congela.

A energia armazenada durante o processo é expressa como:

$$\Delta E = \rho \Delta V c_{ps} (T_m - T_0) + \rho \Delta V L + \rho V c_{pl} (T_f - T_m) \quad (2.3)$$

onde  $\Delta E$  é a energia armazenada [J],  $\rho$  é a massa específica [kg/m<sup>3</sup>],  $\Delta V$  é o volume do meio de armazenamento [m<sup>3</sup>],  $c_{ps}$  é o calor específico no estado sólido [J/kg·K],  $c_{pl}$  é o calor específico no estado líquido [J/kg·K],  $L$  é o calor latente [J/kg],  $T_f$  é a temperatura final [K],  $T_m$  é a temperatura de mudança de fase [K] e  $T_0$  é a temperatura inicial [K].

Um diagrama de energia típico da mudança de fase é apresentado na Fig. 2.2, onde é possível apreciar o platô vertical na temperatura de mudança de fase e a diferença em termos de energia (Entalpia).

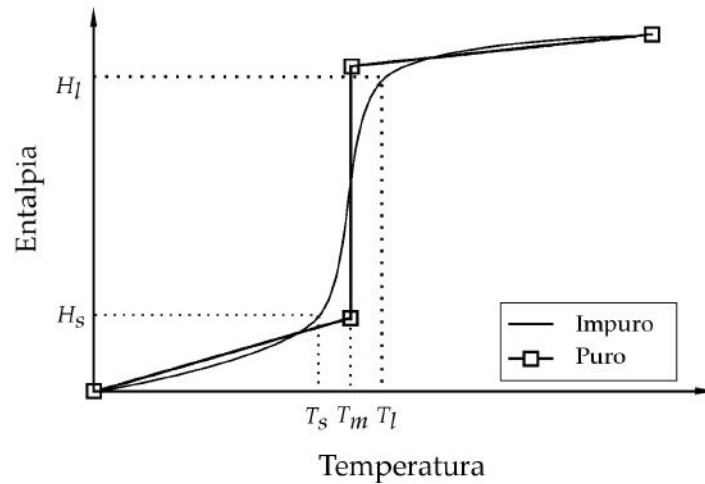


Figura 2.2: Variação da Entalpia com a Temperatura para uma substância impura. Adaptado de ZALBA *et al.* [16]

A Tab. 2.2 apresenta as vantagens e desvantagens do armazenamento por calor latente.

Tabela 2.2: Vantagens e Desvantagens no armazenamento por calor latente [15].

Vantagens	Limitações
<ul style="list-style-type: none"> <li>– Relação eficiente entre a energia armazenada e o meio de armazenamento, ou seja, uma alta densidade de energia;</li> <li>– Benefícios em termos de redução de perdas (quanto menor o tamanho, menor serão as perdas para o meio externo) e em termos do custo;</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>– A tecnologia ainda não é completamente difundida e os materiais de mudança de fase ainda não são fáceis de encontrar;</li> <li>– Os materiais de mudança de fase são caros;</li> <li>– Alguns materiais de mudança de fase ainda não são confiáveis, não se conhecendo completamente sua capacidade de armazenamento.</li> </ul>

## 2.2 Mudança de fase

Diferentes mecanismos atuam quando um sólido funde ou um líquido solidifica. Assim, a mudança de fase implica em transferência de calor e transferência de massa,

sub-resfriamento, absorção ou transferência de calor latente, mudanças nas propriedades termofísicas, efeitos de superfície, etc.

Tanto a fase sólida como a fase líquida se caracterizam pela presença de forças de coesão devido à proximidade entre os átomos que as compõem. Na fase sólida as moléculas vibram em torno de posições fixas de equilíbrio, enquanto que na fase líquida estas moléculas devem permanecer entre estas posições de equilíbrio. A manifestação macroscópica desta energia de vibração é conhecida como energia térmica. Assim, antes que um sólido se funda deverá adquirir uma certa quantidade de energia como uma maneira de superar as forças de coesão que mantêm sua estrutura. Esta energia é conhecida como calor latente da mudança de fase ( $L$ ) do material e representa a diferença de energia térmica (entalpia) entre as fases líquida e sólida. Está claro que para um líquido solidificar é também necessária a transferência desse calor latente e a estruturação de seus átomos em posições de estabilidade [17].

A transição de uma fase para outra em uma substância simples ocorre a uma temperatura na qual a estabilidade de uma fase se rompe em favor da outra em função da energia disponível. Esta temperatura de mudança de fase depende da pressão e outras variáveis termodinâmicas.

A região de transição onde coexistem as fases sólida e líquida é conhecida como interface. Sua espessura pode variar de alguns Angstroms até alguns centímetros, podendo sua microestrutura ser muito complexa, dependendo de diferentes fatores, como: o material em si, a proporção de arrefecimento, o gradiente de temperatura no líquido, a tensão superfície, etc.

Em materiais, que solidificam a um gradiente de temperatura, a interface sólido/líquido é bem definida, como pode ser visto na Fig. 2.3, para um caso unidimensional. Para substâncias que possuem mais de um componente, geralmente devido ao líquido estar abaixo da temperatura de fusão, em um estado termodinamicamente instável, a região de transição entre as fases pode ter uma espessura aparente e é chamada região de mistura ou zona de mistura<sup>1</sup>, podendo sua estrutura ser dendrítica, colunar ou amorfa, conforme ilustrado na Fig. 2.3.

---

<sup>1</sup>Do inglês, *mushy region* ou *mushy zone*.

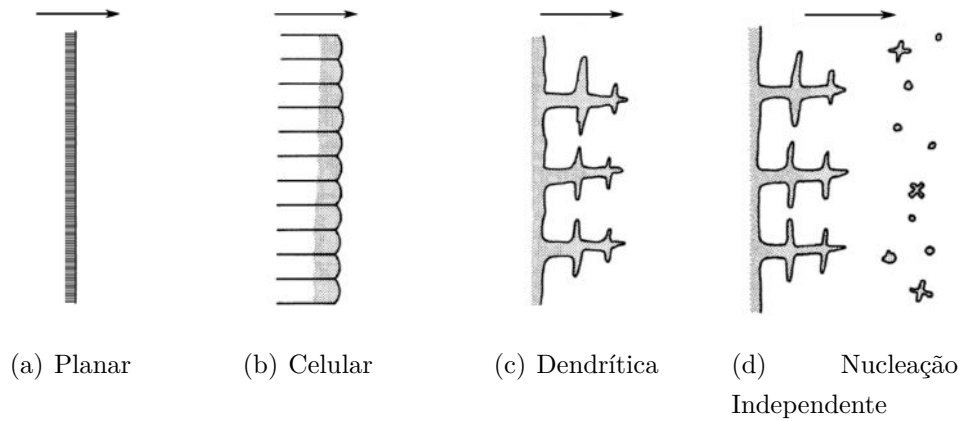


Figura 2.3: Estruturas morfológicas de interface e o modo de crescimento [18].

## 2.3 Materiais de Mudança de Fase

Os materiais de mudança de fase (PCM)<sup>2</sup> fundem-se a uma faixa de temperatura, o que pode ser útil para usos tecnológicos. Os PCM exploram não só o calor sensível, mas também o calor latente, que geralmente é maior do que o calor sensível na maioria dos materiais.

O uso de PCM para sistemas de AET requer que algumas propriedades termofísicas, cinéticas, químicas e econômicas desejáveis, sejam atendidas, mas raramente esse requisitos são cumpridos ao mesmo tempo [19]. A Tab.2.3 apresenta algumas dessas características.

---

<sup>2</sup>Podendo ser encontrado através do nome *Phase Change Materials* - PCM.

Tabela 2.3: Características importantes dos materiais para armazenamento de energia [15, 19, 20].

Propriedades Térmicas	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Temperatura de mudança de fase adequada à aplicação;</li> <li>– Calor latente elevado para a temperatura desejada;</li> <li>– Condutividade térmica elevada tanto na fase líquida como na fase sólida.</li> </ul>
Propriedades Físicas	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Massa específica elevada;</li> <li>– Pequena variação de volume na mudança de fase;</li> <li>– Baixa pressão de vapor;</li> <li>– Equilíbrio de fase favorável;</li> <li>– Não sofrer de sub-resfriamento.</li> </ul>
Propriedades Químicas	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Boa estabilidade;</li> <li>– Compatível com materiais de construção;</li> <li>– Não tóxicos;</li> <li>– Não inflamáveis.</li> </ul>
Aspectos Econômicos	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Baixo Custo;</li> <li>– Abundantes.</li> </ul>

### 2.3.1 Classificação

Em 1983, ABHAT [19] forneceu uma classificação geral à respeito de materiais de mudança de fase para o armazenamento de energia. Mais tarde, LANE [21, 22] fornecem uma discussão detalhada sobre os critérios de seleção e exemplos de como selecionar materiais candidatos. Uma primeira seleção de um material é normalmente feita com relação aos requisitos físicos como temperatura de mudança de fase, entalpia, sub-resfriamento, dentre outros.

Os PCM podem ser divididos em três grupos [19], sendo estes: orgânicos, inorgânicos e eutéticos, como pode ser observado na Fig. 2.4. Lembre-se que nem todos os PCM dessas classes cumprem os requisitos adequados para o AET.

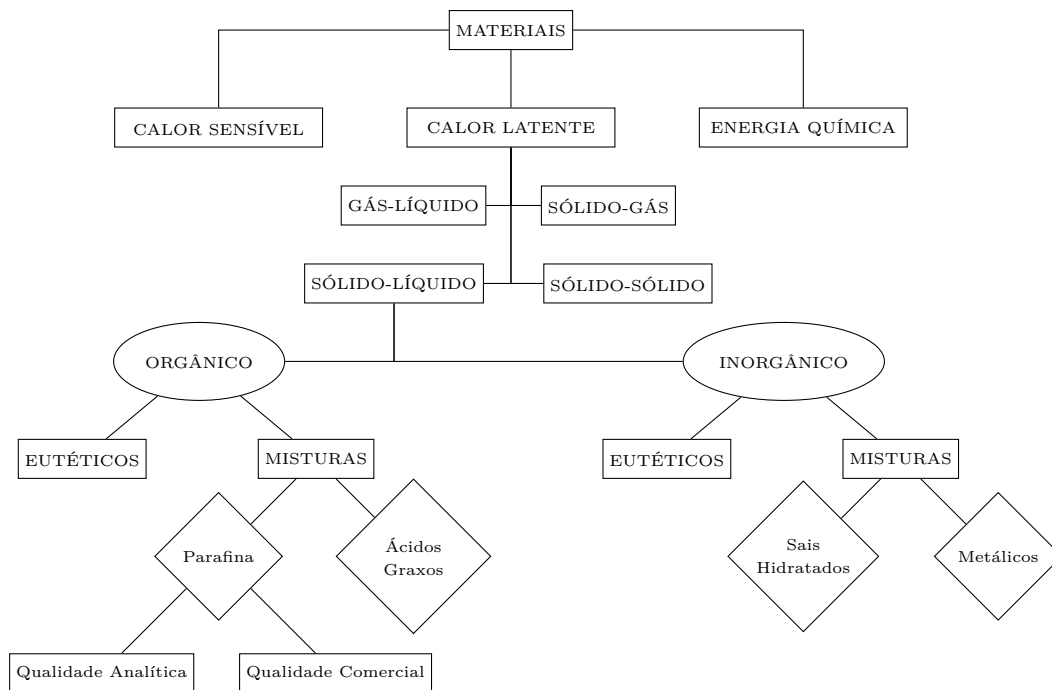


Figura 2.4: Classificação dos materiais de armazenamento de energia térmica.

Uma vez que os dois critérios mais importantes, temperatura de fusão e entalpia de fusão, dependem dos efeitos moleculares, não é surpreendente que os materiais dentro de uma classe se comportem de maneira semelhante [15]. A Fig. 2.5 apresenta uma visão geral esquemática dos tipos de PCM e de seus intervalos de temperatura de fusão.

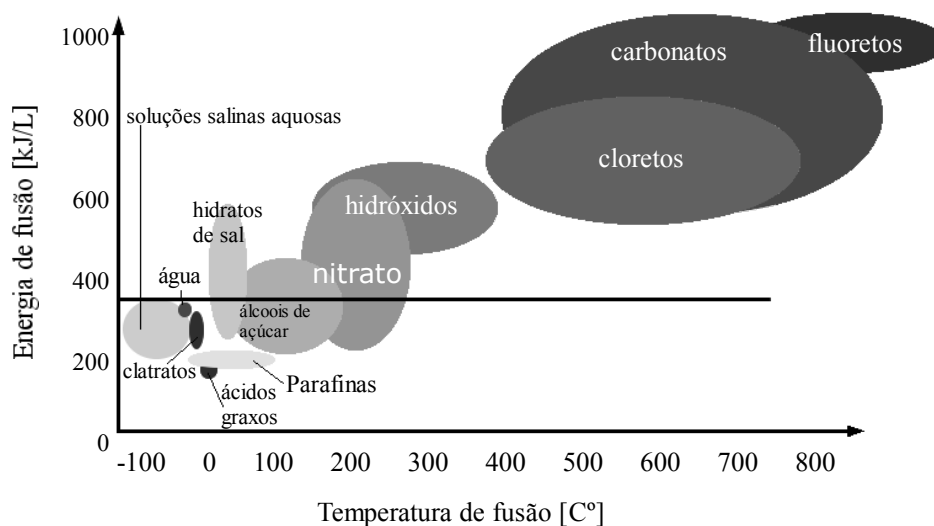


Figura 2.5: Classes de materiais que podem ser utilizados como PCM e sua variação de temperatura de fusão e a entalpia de fusão. © ZAE Bayern.

MEHLING e CABEZA [15] apresentam uma visão geral mais ampliada sobre

as características destes materiais. Como apresentado na Fig. 2.4, os materiais de mudança de fase podem ser classificados em dois grupos: materiais de mudança de fase orgânicos e inorgânicos, os quais por sua vez se dividem em subgrupos. A Tab. 2.4 apresenta as vantagens e desvantagens na utilização desses materiais.

Tabela 2.4: Comparação entre materiais orgânicos e inorgânicos para armazenamento de calor [15].

	Orgânicos	Inorgânicos
Vantagens	Não são corrosivos; Não sofrem do efeito de sub-resfriamento; Estabilidade térmica e química.	Entalpia de mudança de fase elevada.
Desvantagens	Baixa condutividade térmica; Entalpia de mudança de fase baixa; Inflamáveis.	Sofre com o efeito de sub-resfriamento; Corrosão; Separação de fases; Segregação de fases, falta de estabilidade térmica.

### 2.3.2 Problemas e Desafios

Como mencionado na seção anterior, os PCM podem sofrer de diversos problemas. Nesta seção serão relatados alguns desses e o que pode ser feito para que esses problemas possam ser superados.

#### Sub-resfriamento

É a capacidade de alguns líquidos serem resfriados abaixo do seu ponto de congelamento. Pequenas quantidades de água pura podem ser resfriadas até 258,15K, antes de começar a solidificar. Esse efeito afeta materiais durante o processo de extração de calor, não afetando o material enquanto ele é aquecido.

Em alguns casos, o sub-resfriamento pode ser explorado como uma “estratégia” para armazenamento de calor ou para liberar “calor sob demanda”. HIRANO *et al.* [23] estudaram o “armazenamento de energia térmica super-resfriada”, que é uma técnica que utiliza a temperatura de histerese entre fusão e solidificação. Neste trabalho os autores relatam que esta técnica consiste em fundir completamente o PCM pelo excesso de calor no verão, deixando-o à temperatura ambiente sem isolamento térmico durante o inverno.

## Encapsulamento

Na maioria dos casos, com exceção de alguma aplicação de água-gelo, pois essa não tem um efeito nocivo para o meio ambiente, há a necessidade de isolar o PCM do ambiente. Esta estratégia permite o confinamento de MMC líquido e a capacidade de evitar contatos com o ambiente. Por outro lado, essa prevenção pode acarretar em trocas químicas da cápsula na composição do PCM. O encapsulamento pode ser realizado em duas escalas: macroencapsulamento - que é o sistema de contenção mais comum, microencapsulamento - que consiste no encapsulamento de PCM em partículas de  $1\mu\text{m}$  a  $1.000\mu\text{m}$  de diâmetro com uma casca sólida, ou nanoencapsulamento, onde nanomateriais são depositados em cápsulas contendo algum tipo de PCM. Muitos são os trabalhos que lidam com o encapsulamento e todos os autores, de uma maneira geral, concordam que para que haja a utilização do encapsulamento, são necessários alguns conhecimentos prévios do material, como:

- i) compatibilidade do material do recipiente com o PCM, em termos de corrosão ou outro comportamento químico inesperado [24, 25];
- ii) mudança volumétrica do PCM, pois alguns têm uma grande mudança volumétrica durante a mudança de fase e, portanto, os recipientes devem cumprir o requisito de realização [26];
- iii) requisitos de transferência de calor, o que faz com que em algumas aplicações o recipiente deva ser feito de metal para aumentar o mecanismo de troca de calor [27];
- iv) estabilidade mecânica e fácil manuseio[15, 26].

O encapsulamento de PCM acarreta, caso bem aplicado, em uma taxa de transferência de calor melhorada com a área de superfície de contato entre o PCM e a cápsula. Para encapsular o PCM em pequenas cápsulas, a superfície de contato é aumentada para compensar a baixa condutividade térmica do PCM, o que evita a segregação de fase e a sedimentação, bem como oferece uma elevada área para a transferência de calor [28].

## Transferência de Calor

Líquidos não metálicos são caracterizados por uma condutividade térmica muito baixa, que pode afetar drasticamente o mecanismo de troca de calor. Muitas vezes, os PCM têm uma condutividade térmica muito baixa ( $0,1 - 1\text{W/mK}$ ) que pode ser ligeiramente aumentada na fase líquida devido a convecção[28–30]. Em consequência disso, o problema afeta a fase sólida e, portanto, para que um PCM



torne-se adequado para aplicações onde é necessária uma boa transferência de calor, sua condutividade térmica necessita ser melhorada, ou deve-se buscar encontrar uma maneira de melhorar o mecanismo de transferência de calor, melhorando em decorrência disso as taxas de carga e descarga.

Duas estratégias podem ser empregadas para melhorar a transferência de calor:

- I) atuar diretamente nas propriedades termofísicas do PCM, adicionando materiais altamente condutores como metais ou grafite, de modo a se obter um Material de Mudança de Fase composto (PCM<sub>c</sub>);
- II) otimizar o mecanismo de troca de calor, utilizando para isso aletas, espumas metálicas, ou aumentando a razão superfície-volume e assim a penetração do fluxo térmico dentro do PCM.

No caso dos PCM<sub>c</sub>, em função da dimensão do material que será incorporado, é necessário ainda distingui-los em três tipos:

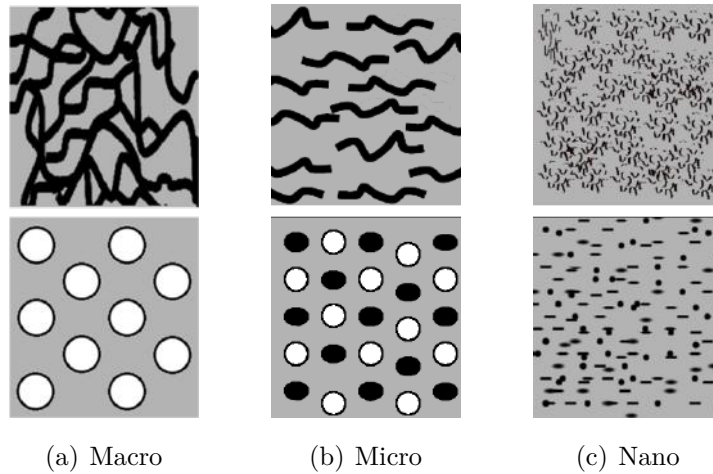


Figura 2.6: Esboço de Materiais de Mudança de Fase aprimorados apresentados na escala macro, micro e nanométrica. A cor cinza se refere ao PCM, e as brancas e escuras ao material incorporado.

- i) material macro-PCM<sub>c</sub>, quando o PCM é incorporado em uma matriz altamente condutora feito de metal ou grafite[31, 32];
- ii) material micro-PCM<sub>c</sub>, quando o material para o composto é incorporado em uma matriz PCM, podendo ser na forma de fibras e pós metálicos;
- iii) material nano-PCM<sub>c</sub>, ou material nano aprimorado, quando o agente dopante opera na nanoescala. Neste caso, o agente nano é tipicamente composto de Nanotubos de Carbono (NTC) ou Nanopátulas metálicas (Cu, CuO, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, ZnO)[33, 34].

A criação de um material composto apresenta uma desvantagem importante: a diminuição do calor latente. Este diminui linearmente com a fração mássica dos aditivos e, portanto, uma relação entre o aumento da taxa da troca de calor com tal diminuição deve ser levada em consideração. Isso ocorre porque o aditivo misturado com o PCM modifica a capacidade de cristalização. Assim, o tamanho do cristalito torna-se menor durante o crescimento dos cristais, e o aditivo atua como impureza. Tal redução pode ser observada em KHODADADI e HOSSEINIZADEH [30], onde os autores relatam uma diminuição do calor latente com a adição de nanopartículas de cobre em um material de mudança de fase fazendo uso da Eq. (2.4)

$$(\rho L)_{mn} = (1 - \gamma)(\rho L)_{mb} \quad (2.4)$$

onde  $\rho$  é a massa específica do PCM [kg/m<sup>3</sup>],  $\gamma$  é a fração volumétrica de nanopartículas [-] e  $L$  é o calor latente [J/kg]. Os subscritos  $mn$  se refere ao material de mudança de fase nano-aprimorado e o  $mb$  refere-se ao material base.

## 2.4 Nanotecnologia na estocagem térmica de energia

Com os avanços nas nanociências e a redução dos custos ligados à fabricação de partículas na escala nanométrica, o uso de nanoaditivos puderam ser indicados como adequados para melhorar as propriedades térmicas nos PCM.

Nanoestruturas altamente condutoras foram utilizadas para melhorar a transferência de calor em fluidos, isto é, nanofluidos, aumentando a condutividade térmica em comparação com os líquidos bases [35]. Entretanto, segundo DAS *et al.* [36] a utilização dos nanofluidos inicialmente foi principalmente focada em uma fase única e transferência de calor líquido-vapor.

Inspirados pelos estudos de suspensões de nanopartículas em nanofluidos, KHODADADI e HOSSEINIZADEH [30] propuseram uma abordagem alternativa como uma maneira de formar compósitos de PCM para aumento da condutividade térmica, utilizando nanopartículas altamente condutoras, originando o Material de Mudança de Fase nanoaprimorado (NePCM)<sup>3</sup>. KHODADADI e HOSSEINIZADEH [30] realizaram uma simulação numérica envolvendo do congelamento da água e um NePCM a base de água com nanopartículas de cobre (Cu) em uma cavidade quadrada aquecida lateralmente. Os autores observaram que, parcialmente, devido a aumento da condutividade térmica e também a redução do calor latente de fusão, maior foi a taxa de liberação de calor do NePCM em relação a base de PCM (água).

---

<sup>3</sup>Originalmente *Nanoparticle-enhanced Phase Change Materials*.

Nos últimos anos, o grande potencial desta classe de PCM tem sido cada vez mais explorados.

Vários autores têm se dedicado a preparação e caracterização de NePCM, que são constituídos de várias combinações de PCM base, com vários tipos de nanopartículas [37], fato esse que pode ser observado com o aumento dos artigos de revisão sobre o assunto<sup>4</sup>

De acordo com ZENG *et al.* [38], em contraste com o alto índice de dados documentados para as propriedades termofísicas do NePCM, poucos trabalhos têm sido desenvolvidos sobre as implicações destes na mudança de fase sólido-líquido. Investigações experimentais sobre a transferência de calor de NePCM em problemas de solidificação/fusão também foram realizadas, a fim de testar o desempenho e justificar a aplicabilidade de NePCM em aplicações de armazenamento térmico [39].

A medida que os processos de solidificação foram simplificados para serem dominados pela condução, a aceleração prevista da solidificação é provavelmente atribuída ao aumento da condutividade térmica dos NePCM, sendo este fato verificado experimentalmente por diversos autores, dentre os quais pode-se citar o trabalho de KUMARESAN *et al.* [40]. A coerência entre o aumento da condutividade térmica e rápida solidificação dos NePCM foi ainda confirmada através de experimentos de solidificação unidirecional com efeito de sub-resfriamento [39, 41].

Investigações sobre o aprimoramento da transferência de calor e convecção com o uso de nanomateriais tem sido cada vez mais realizadas, tanto experimentalmente, numericamente e teoricamente, tendo como objetivo determinar o fenômeno responsável pelo aprimoramento que esses materiais causam nos PCM. Além disso, muitas aplicações tem como foco os diferentes métodos de síntese de preparação, caracterização, suspensão e transferência de calor em material nanoaprimorados[42–45].

A transferência de calor por solidificação de NePCM tem sido altamente estudada numericamente ao longo dos últimos anos. Nestes trabalhos, os autores consideram tratar os NePCM como materiais homogêneos monofásicos com propriedades termofísicas equivalentes, ou seja os comportamentos de transferência de calor das nanopartículas não são levados em consideração [30, 46, 47].

No trato do fenômeno da fusão de NePCM, no entanto, o efeito da presença das nanopartículas não é evidente, uma vez que a convecção natural na massa fundida geralmente domina no fenômeno. Tal como feito para a solidificação, muitos autores têm investigado numericamente, no âmbito de uma simplificação para uma única fase, esse tipo de processo [38, 48, 49]. Nestes trabalhos a aceleração da fusão foi prevista e os respectivos resultados numéricos obtidos, no entanto, são possíveis de questionamento, devido as grandes incertezas associadas com os dados de viscosi-

---

<sup>4</sup>Segundo a plataforma Science Direct, nos últimos anos foram computados aproximadamente 100 artigos com o tema *Nano-enhanced phase change materials*. Acesso em: 15 jan. 2018, 16:30:00.

dade e de condutividade térmica eficaz dos NePCM adotados para as simulações, dos quais foram previstas com base tanto em modelos de mistura ou de correlações empíricas. HO e GAO [50] afirmam que, em conjunto com o aumento da condutividade térmica, a presença das nanopartículas também aumentaria a viscosidade de NePCM, sofrendo como penalidade a degradação de convecção natural.

Muitos estudos na área de NePCM têm sido realizados com o propósito de se investigar as mudanças acarretadas com a inserção de nanopartículas metálicas dentro dos PCM. RANJBAR *et al.* [51] investigaram a influência da utilização de nanopartículas no aumento da transferência de calor em uma cavidade tridimensional. Eles mostraram que as nanopartículas suspensas aumentam substancialmente com a taxa de transferência de calor.

WU *et al.* [52] desenvolveram um PCM nanofluídico obtido através da inserção de uma pequena quantidade de nanopartículas em parafina líquida. As nanopartículas de Cu, Al e C/Cu foram adicionadas de maneira a aumentar a taxa de transferência de calor da parafina. Eles concluíram que as nanopartículas de Cu apresentam o melhor desempenho para a transferência de calor. Segundo BOSE e AMIRTHAM [53], geralmente metais têm uma excelente condutividade térmica, podendo-se esperar aumentar a condutividade térmica dos PCM significativamente quando aplicados em escala nanométrica pois, aditivos nanométricos tendem a melhorar o desempenho da suspensão, a área específica da superfície e o desempenho da transferência de calor. SEBTI *et al.* [33] investigaram numericamente a fusão de uma parafina contendo nanopartículas de Cu em uma anel cilíndrico 2D usando a técnica de porosidade entálpica, variando as frações de nanopartículas testando o desempenho sobre a fusão e na convecção natural. Os autores comparam seus resultados com outros artigos numéricos e experimentais, chegando a conclusão que a adição das nanopartículas melhorou a condutividade térmica e aumentou a transferência de calor no PCM base e que uma maior concentração de nanopartículas leva a uma melhor taxa de armazenamento de energia, entretanto a questão da dispersão das nanopartículas não é abordada.

LIN e AL-KAYIEM [54] apresentaram resultados de investigação de ambos; os testes laboratoriais sobre as propriedades termofísicas dos nanocompósitos de NePCM de cobre e a medição experimental real no local para testar o desempenho real do aquecedor de água solar integrado. Eles melhoraram as propriedades de cera de parafina por nanoaditivos para sintetizar o composto nano-PCM para armazenamento de energia térmica. Eles dispersaram 20 nanômetros de nanopartículas de cobre e testaram o desempenho aprimorado do aquecedor de água solar integrado com AET.

Em DHAIDAN *et al.* [55], os autores investigam a fusão de um PCM (n-octadecano com nanopartículas CuO dispersas em um recipiente cilíndrico horizon-

tal de alumínio sob um fluxo de calor constante, para melhoramento da condução térmica, tanto experimental como numericamente. Eles emulsionam o NePCM em diferentes frações de massa (1%, 3% e 5% em massa) e concluem que a adição aumentou a condutividade térmica efetiva e melhorou o processo de fusão do PCM. A taxa de processo de fusão foi maior com um menor valor de nano-aditivos, mas essa taxa diminuiu para maiores valores de concentração de nanopartículas devido aos efeitos crescentes da viscosidade, aglomeração e sedimentação.

ŞAHAN *et al.* [56] realizam um experimento com o objetivo de aumentar a condutividade de parafina utilizada como PCM, sendo incorporado nanopartículas  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ . Neste trabalho os autores investigam o comparativo entre o novo material, onde são utilizadas várias concentrações de nanopartículas, e o da parafina pura, onde relatam que houve um aumento de até 67% na condutividade térmica. Os autores relatam também que não houve mudanças significativas no calor latente da parafina, enquanto que seu ponto de fusão permaneceu inalterado.

De acordo com LIN e AL-KAYIEM [57], os trabalhos referentes a NePCM na literatura sofrem com a falta de estudos para o aprimoramento de parafinas por nanoaditivos para aplicações em AET. Além disso, eles afirmam que isso é uma indicação de que há uma falta no teste de desempenho real do coletor solar integrado com os NePCM. Os autores investigaram cinco amostras de nanocompósitos NePCM de Cu para determinar sua eficácia em um sistema solar integrado de AET. A mudança na temperatura de fusão e solidificação revelou que as nanopartículas de Cu atuam como agente de nucleação para diminuir o efeito de sub-resfriamento durante o processo de mudança de fase. Foi demonstrado que as nanopartículas de Cu provocam o aumento da condutividade térmica em mais de 46,3% e um aumento de 1,7% na eficiência de AET. Estes resultados são indicadores que as nanopartículas de Cu podem ser empregadas para melhorar o desempenho dos sistemas de armazenamento de energia solar.

## 2.5 Métodos de Solução de Problemas Diretos de Mudança de Fase

Estudos de soluções para problemas de solidificação e fusão são associados a muitas aplicações práticas, estão presentes na literatura desde o século XIX e consistem em problemas dependentes do tempo onde a posição do contorno deve ser determinada como uma função do tempo e do espaço. Conhecidos também por problemas de fronteira móvel, como é o caso dos chamados problemas de Stefan, começaram a ser estudados em 1831 por Lamé e Clapeyron. No entanto, em 1889 e 1891, Stefan, deu sequência a esse trabalho, dando seu nome a esta família de problemas, resultado de seu estudo sobre o derretimento da calota de gelo polar por volta de 1890 [58]. Para tal, foi definido o número de Stefan,

$$St = \frac{c_p \Delta T}{L} \quad (2.5)$$

onde  $c_p$  é o calor específico a pressão constante [J/kg·K],  $L$  é o calor latente [J/kg] e  $\Delta T$  é a variação de temperatura [K], respectivamente.

O número de Stefan é adimensional e relaciona a capacidade calorífica e o calor latente do material em mudança de fase. Inicialmente ele foi concebido para problemas com regiões semi-infinitas, porém pode ser facilmente aplicado para problemas de regiões limitadas. Note que, no caso de propriedades físicas diferentes, o problema apresentará dois números de Stefan, um para a fase sólida e outro para a fase líquida.

Em problemas práticos, as propriedades termofísicas podem variar de acordo com as fases, temperatura e concentração, e mecanismos de transporte diferentes (por exemplo, convecção, condução e radiação) podem acontecer simultaneamente. A modelagem matemática e as simulações computacionais, muitas vezes, tornam as soluções mais econômicas, posto que os recursos necessários para empreendê-las são baixos, quando comparadas com as técnicas experimentais, favorecendo a compreensão dos processos práticos que envolvem os problemas de fronteira móvel. Atualmente, na maioria das aplicações de engenharia, a solução de problemas de fronteira móvel tem sido feita por análises numéricas que utilizam diferenças finitas, elementos finitos, ou elementos de contorno [58].

Soluções analíticas são importantes para a investigação precisa do comportamento da solidificação e da fusão, uma vez que as técnicas experimentais são frequentemente mais dispendiosas. Além disso, estas soluções podem nos fornecer uma visão física mais profunda para o problema em questão. Embora os métodos analíticos possam nos oferecer uma solução exata e matematicamente mais elegante, devido às suas limitações, esses tipos de soluções abordam, principalmente, os casos

unidimensionais de uma região infinita ou semi-infinita, com condições iniciais e de contorno simples e propriedades térmicas constantes.

Alguns anos atrás, as únicas soluções disponíveis e de entendimento destas classes de problemas eram por meio de métodos analíticos. Em 1891, Stefan, encontrou a solução exata para o problema, que foi chamado de método de Neumann. Essa solução é expressa em termos da função erro. Inicialmente este problema foi resolvido para coordenadas retangulares, que posteriormente foi estendido para coordenadas cilíndricas. A solução foi obtida a partir das hipóteses: condições de contorno de temperatura prescrita, regiões semi-infinitas, propriedades constantes e condição inicial de temperatura uniforme.

Devido a sua simplicidade, tornou-se clara a necessidade de estudos mais detalhados nessa área para a soluções de casos mais reais. Nesta seção serão mostrados trabalhos que apresentaram soluções analíticas e soluções numéricas, com surgimento mais recente. Observe que os trabalhos apresentados são somente alguns dos que foram mais importantes para a compreensão da evolução das soluções, e então nem todas as metodologias serão mostradas.

Como já citado, as soluções analíticas para um problema de mudança de fase, mesmo com aproximações, têm o seu emprego extremamente limitado. Assim, soluções híbridas e numéricas se fazem necessárias, proporcionado a avaliação de situações físicas mais complexas que as estudadas por Stefan e Neumann.

Essa limitada aplicação das soluções analíticas e o grande interesse no estudo do problema de Stefan resultaram em um amplo número de métodos de soluções para a mudança de fase. Dentre os possíveis métodos de soluções, têm-se: Método de iteração variacional, Método de parâmetros concentrados, Método de perturbação, Método de malha fixa, Método de malha variável, Método de passo de tempo variável, Método de entalpia [58–66].

Os métodos numéricos usados em problemas de solidificação e fusão podem ser classificados como de soluções fortes e de soluções fracas. As soluções fortes resolvem diretamente o problema de fronteira móvel, sendo a frente de solidificação parte fundamental na solução do problema. Por outro lado, as soluções fracas incorporam os efeitos de mudança de fase nas propriedades termofísicas. Portanto, a posição da frente de solidificação não é parte da solução, mas uma consequência da solução do campo de temperaturas.

O Método de Iteração Variacional (MIV<sup>5</sup>), é um método utilizado para cálculo analítico com solução aproximada. O método é baseado na aplicação da solução por operadores lineares e não lineares. JAFARI *et al.* [59] solucionou o problema de Stefan com o auxílio deste método, o qual por ser considerado recente, e não apresenta estudos significativos sobre o potencial para a solução em problemas mais

---

<sup>5</sup>Do inglês *Variational Iteration Method* - VIM

complexos, impossibilitando qualquer aplicação mais detalhada do mesmo.

O Método de Balanço Integral de Calor (MBIC<sup>6</sup>), desenvolvido por Goodman em 1958 é um método aproximado bem conhecido para resolver problemas de Stefan [67]. A idéia básica por trás do método é aproximar o perfil de temperatura, geralmente com um polinômio, sobre alguma distância, conhecida como a profundidade de penetração de calor. A equação do calor é então integrada a fim de determinar uma equação diferencial ordinária simples para essa distância. A solução desta equação, acoplada em seguida com a condição de Stefan, determina a temperatura e a posição da frente de mudança de fase  $s(t)$ . A popularidade do MBIC é principalmente devido à sua simplicidade. No entanto, na sua forma original, há um número de desvantagens, principalmente a falta de precisão para certos problemas, mas também da escolha arbitrária de função de aproximação, conforme mencionado por MITCHELL e MYERS [60], onde os autores apresentam uma descrição mais detalhada deste método e alguns problemas relacionados.

O Método dos Parâmetros Concentrados Aperfeiçoado para Problemas de Condução de Calor com Mudança de Fase foi desenvolvido por MENNIG e ÖZİŞİK [61] utilizando uma formulação que inicialmente chamaram de aproximação da integral acoplada. O trabalho foi voltado para a solução da posição da interface de mudança de fase na fusão de uma meio semi-infinito, desta forma, voltando os esforços de maneira a encontrar uma equação diferencial para a posição da interface. Nesta primeira formulação aperfeiçoada os autores utilizaram a regra do trapézio para a aproximação das integrais.

A solução por perturbação é um outro método utilizado em problemas de mudança de fase, sendo seu uso iniciado na década de 70. Devido a sua essência, a solução foi validada somente para pequenos números de Stefan [62].

Os métodos supracitados exigem um tratamento analítico e, desta maneira, apresentam uma baixa aplicabilidade. Neste caso, o estudo de métodos numéricos são mais indicados. Abaixo serão comentados os métodos numéricos como malha fixa, malha variável, passo de tempo variável e método de entalpia.

O método que utiliza uma malha fixa é de formulação mais simples, onde todo sistema é discretizado normalmente e a interface se propaga de modo irrestrito na malha. Já a formulação com malha variável é muito mais complexa. A ideia é manter a interface de mudança de fase sempre no mesmo nó fazendo com que a discretização comprima e estique de acordo com a propagação. A solução por entalpia faz com que a equação seja escrita em termos da entalpia do material, mantendo a relação entre entalpia e temperatura [58].

Apresentada inicialmente por ZHAOCHUN *et al.* [63], o algoritmo utilizando o passo de tempo variável funciona calculando um novo passo de tempo, onde a cada

---

<sup>6</sup>Do inglês *Heat balance integral method* - HBIM.



passo a interface de mudança de fase se propaga de um nó para o próximo. Os autores comparam esta solução com solução analítica para o respectivo problema, obtendo ótimos resultados. Entretanto os autores concluem que, embora, o método possivelmente possa apresentar solução para problemas de duas regiões (sólida e líquida), ainda precisa ser mais estudado.

A característica essencial dos métodos de entalpia é que a evolução do calor latente é contabilizada pela entalpia, bem como a relação entre a entalpia e temperatura. O método pode ser ilustrado considerando-se um problema unidimensional de condução de calor. A equação de conservação de energia apropriada para tal caso, pode ser expressa como

$$\rho \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right). \quad (2.6)$$

A relação entre a entalpia e temperatura pode ser definida em termos das características de liberação de calor latente do material de mudança de fase. Esta relação é geralmente assumida como sendo uma função descontínua para substâncias puras de mudança de fase e uma função contínua para substâncias impuras casos de não-isotérmicos de mudança de fase [17, 68, 69]. A Fig. 2.2 apresenta as curvas de entalpia por temperatura para os casos de substância pura e impura, respectivamente.

A entalpia em função da temperatura, para ambos os casos, é fornecida respectivamente pelas seguintes equações:

$$H = \begin{cases} c_{ps}T & T \leq T_m & \text{fase sólida} \\ c_{pl}T + L & T > T_m & \text{fase líquida} \end{cases} \quad (2.7)$$

$$H = \begin{cases} c_{ps}T & T \leq T_s & \text{fase sólida} \\ c_{psl}T + \frac{L(T - T_s)}{(T_l - T_s)} & T_s \leq T \leq T_l & \text{fase sólida/líquida} \\ c_{pl}T + L & T \geq T_l & \text{fase líquida} \end{cases} \quad (2.8)$$

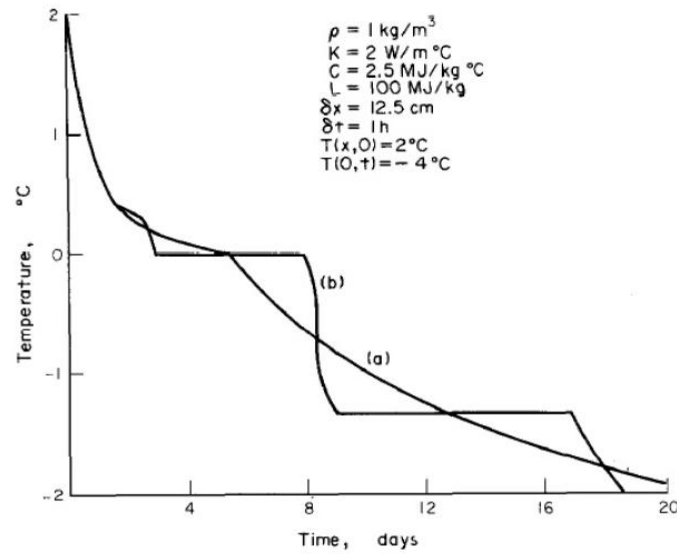


Figura 2.7: Oscilações da solução por método de entalpia [65].

Apesar da solução por entalpia apresentar uma formulação mais simplificada e ótimos resultados pontuais para a temperatura e propagação da interface, esta formulação pode apresentar respostas com oscilações numéricas sem sentido físico em torno da interface de fusão. Podemos observar a oscilação no gráfico da Fig. 2.7, que mostra a evolução temporal da temperatura em um determinado ponto da geometria.

Outro problema recorrente é o custo computacional, já que a solução implícita apresenta um método iterativo e a solução explícita necessita atender um critério de estabilidade. PHAM [64] apresentou que o custo computacional pode ser maior para o caso da solução implícita. Com isso, alguns trabalhos foram realizados a fim de minimizar tal problema, sendo um bom exemplo o trabalho de PHAM [64], em que o problema foi solucionado acoplando a solução de entalpia explícita e uma solução por temperatura utilizando a capacidade volumétrica.

Em 1981, VOLLER e CROSS [65] realizaram um trabalho muito importante, para contornar o problema da oscilação, que pode ser observado na Fig. 2.7. O mais importante é que o procedimento não modificou a base da solução do método de entalpia, e os resultados foram encontrados para uma metodologia explícita e apresentaram erros menores que 0,1% quando comparados com soluções analíticas. Como resultado do procedimento, a Fig. 2.8 mostra o perfil da temperatura no tempo para uma posição fixa.

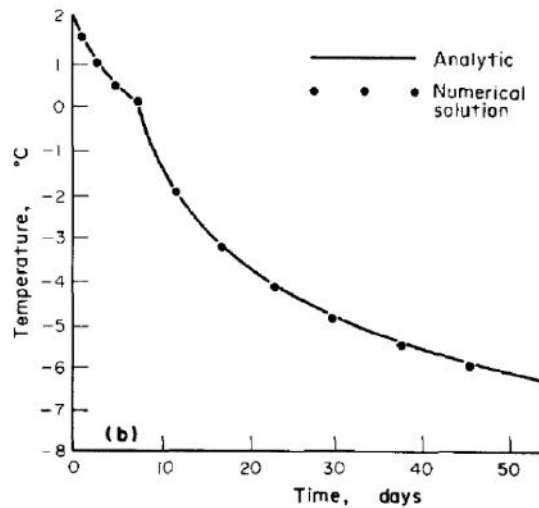


Figura 2.8: Solução por método de entalpia modificado [65].

Segundo VOLLER [70], este procedimento pode também ser aplicado para uma metodologia implícita, minimizando assim as oscilações. Neste trabalho também foram mostradas algumas metodologias implícitas, inclusive um novo conceito de solução por entalpia, criado pelo autor, onde o calor latente é tratado como uma fonte de calor variável no tempo. Neste trabalho foi feita a revisão de várias soluções. Todas apresentaram resultados similares, porém, a nova metodologia implicou em um menor esforço computacional.

Vale a pena reforçar que a metodologia por entalpia necessita de um modelo de discretização. Todas as soluções mostradas acima apresentam uma discretização por diferenças finitas, mas outros modelos se fazem presentes. Segundo HU e ARGYROPOULOS [58], soluções com metodologia de elementos finitos implícitos são pouco utilizadas, sendo mais comum a solução por diferenças finitas. Ainda de acordo com os autores, apesar das desvantagens do método como a oscilação numérica e o custo computacional elevado, que aos poucos são contornados, o método apresenta algumas vantagens fundamentais, sendo elas: a maior facilidade de implementação e resultados mais acurados quando comparado com a solução por diferenças finitas clássica.

O método da entalpia também foi abordado por VOLLER *et al.* [66] onde os autores propuseram três modelos diferentes para a análise de misturas binárias em geometria cartesiana bidimensional, sendo estes: Modelo A (modelo de mistura fluidica), Modelo B (modelo dendrítico em coluna, com modelo de microestrutura dispersa) e Modelo C (modelo dendrítico em coluna, com modelo de microestrutura distinta). Mais tarde, COLAÇO e DULIKRAVICH [71] utilizam a mesma formulação que a proposta no Modelo A para um problema de otimização, buscando reduzir

os desvios padrão da vorticidade dentro da região líquida, bem como reduzir a área líquida em todo o domínio. Assim, os autores ainda estenderam o problema de otimização para encontrar simultaneamente condições de fronteira térmica e magnética que devem induzir os perfis de concentração e de velocidade de soluto prescritos. O Modelo A será apresentado posteriormente no Capítulo 3, onde será utilizado como modelo bidimensional adotado para fins desta tese.

VOLLER [72] busca ampliar os métodos de entalpia para resolver problemas de liga binária, envolvendo uma interface de mudança de fase para um problema de solidificação. A extensão proposta do método da entalpia é relacionada com o esquema de CROWLEY e OCKENDON [73], em que os autores resolvem um binário, onde as equações de calor e transferência de massa são acopladas através das condições no limite da fase móvel, não havendo a presença da zona de mistura. Neste trabalho VOLLER [72] levam em consideração características antes não abordadas em métodos da entalpia, como o tratamento simultâneo das equações de energia e massa, incorporando o tratamento das propriedades descontínuas em toda a interface sólido/líquido. São incorporados também a capacidade para lidar com uma condição de contorno de temperatura fixa e propriedades descontínuas. Em 2006, VOLLER [74] apresentou uma solução por similaridade, que serve como solução analítica para esse problema, combinando os conceitos das soluções de RUBINSTEIN [75], com a de CARSLAW e JAEGER [76]. O tratamento das equações apresentadas por VOLLER [72] será apresentado posteriormente no Capítulo 3, onde essas equações serão utilizadas para o modelo unidimensional abordado nesta tese.

## 2.6 Problemas Inversos

A aplicação da classe de problemas denominados como problema inverso, com o passar dos anos, vêm se tornando cada vez mais um aspecto importante nos diversos campos da ciência. Em problemas inversos, tenta-se obter informações sobre um objeto desconhecido usando dados indiretos e possivelmente imprecisos.

HADAMARD [77] deu um passo significativo na classificação dos diversos problemas associados com equações diferenciais, introduzindo a noção de um problema matemático classificado como bem posto, sendo associado com as propriedades de existência, unicidade e estabilidade das soluções, servindo como ponto de partida inclusive para os trabalhos tidos como clássicos na área de problemas inversos, produzidos a partir da segunda metade do Séc. XX.

Partindo da hipótese de que era possível fazer uma analogia entre os níveis quantizados de energia e os autovalores de equações diferenciais, Viktor Ambartsumian em 1929 analisou a possibilidade de, através de um conjunto de autovalores, de-

terminar a forma do problema aos quais estes autovalores pertenciam, abordando assim o chamado “Problema Inverso de Sturm-Liouville” [78]. Embora seu trabalho tenha sido publicado em 1929, o interesse em problemas inversos começou a crescer em meados da década de 1940 [79].

O termo “Problema Inverso” foi popularizado com a realização de alguns trabalhos desenvolvidos durante a década de 1960, tal como o trabalho de BACKUS e GILBERT [78]. Neste trabalho, os autores buscaram estimar a massa específica e os módulos de compressibilidade e de cisalhamento do planeta Terra, testando conjuntos distintos de observações. Dois primeiros conjuntos utilizavam como dados valores medidos experimentalmente de massa, momento de inércia e de frequências de oscilação dos modos de vibração da Terra, resultando em estimativas de baixa qualidade, que os autores associam ao fato de o problema direto proposto não estar suficientemente adequado à física do problema. Em um terceiro conjunto de observações, cujos valores de massa, momento de inércia e frequência foram simulados produziram boas estimativas, verificando o algoritmo desenvolvido. Ao fim deste trabalho, os autores se propuseram a efetuar correções para levar em conta efeitos desprezados na concepção do problema direto.

TIKHONOV e ARSENIN [80] apresentaram um dos primeiros trabalhos no campo de problemas mal postos que obteve sucesso em fornecer uma definição matemática precisa de “soluções aproximadas” para classes gerais de problemas deste tipo e em construir soluções ótimas. Uma das grandes contribuições deste trabalho foi a introdução do conceito de um operador de regularização, com o objetivo de produzir soluções aproximadas de problemas mal postos que sejam estáveis em relação aos dados de entrada, técnica que ficou conhecida como a Regularização de Tikhonov. Concomitante a este trabalho, outros cientistas buscaram caminhar na direção da solução específica de problemas inversos. BECK e ARNOLD [81] através de conceitos estatísticos e de metodologias já conhecidas, como o Método dos Mínimos Quadrados, abordaram o problema de Estimativa de Parâmetros. Foram introduzidos, também, conceitos até hoje importantes na estimativa de parâmetros, como o coeficiente de sensibilidade e o projeto do experimento ótimo.

Alguns anos posteriormente, com o crescente interesse dos autores na área de problemas inversos, com ênfase em problemas de condução de calor, BECK *et al.* [82] apresentaram um trabalho direcionado para o problema de Estimativa de Funções. Embora voltadas para aplicações em problemas de condução de calor, as técnicas presentes neste trabalho se mostraram suficientemente gerais, sendo aplicáveis em outros campos do conhecimento.

Com o passar dos anos a regularização de Tikhonov tornou-se um dos métodos mais gerais para a solução de problemas mal postos. Além disso, trabalhos inspirados nesta técnica culminaram no desenvolvimento de uma teoria ampla no sentido

matemático, abrangendo um grande número de métodos de regularização dentro da proposta original de Tikhonov.

Buscando preencher algumas lacunas deixadas ao longo dos anos devido a atenção dispensada das bibliografias em torno da solução de problemas inversos, onde eram apresentados as técnicas com elevado rigor matemático, poucas aplicações práticas e pouca atenção aos aspectos práticos da implementação destas metodologias, publicações como as de ÖZİŞIK e ORLANDE [83] deram igual importância para os aspectos teóricos e práticos. Neste livro, os autores, dão a devida importância para os tópicos fundamentais, como problemas mal postos, técnicas de regularização e coeficientes de sensibilidade, mas também apresentam exemplos de aplicação em problemas de transferência de calor, sendo realizadas comparações entre os resultados obtidos com diferentes metodologias, através da análise de grandezas como tempo computacional, número de iterações e erro RMS. Um destaque neste trabalho foi tornar evidente alguns pontos para os quais se é necessária uma maior cautela, como a verificação de independência linear entre os parâmetros a serem estimados, a magnitude do parâmetro de regularização e determinadas particularidades do problema adjunto na vizinhança do tempo final de experimento.

### 2.6.1 Inferência Bayesiana

A inferência Bayesiana é uma técnica estatística que permite a solução do problema inverso na forma de inferência estatística sobre a distribuição de probabilidade *a posteriori*, de modo que o desafio é obter esta distribuição. Uma das técnicas de amostragem mais comumente utilizadas e, por assim dizer, popular, é a Técnica de Monte Carlo com Cadeia de Markov (MCMC) [5]. Esta metodologia tem sido utilizada com grande êxito na solução de problemas inversos, através de algoritmos como o de Metropolis-Hastings, e permitiu que fosse desenvolvida uma vasta literatura sobre o assunto.

A Filtragem Bayesiana é tida atualmente como uma das metodologias mais atuais na solução de problemas inversos de estimativa de estado. Publicado em 1960 e sendo visto com certo ceticismo pela comunidade acadêmica na época, o trabalho de KALMAN [8] consolidou o Filtro de Kalman como uma das maiores descobertas na Teoria de Estimativas do Séc. XX, permitindo tecnologias de controle de navegação que tornaram a Era Espacial possível [10]. GREWAL e ANDREWS [10] dedicam seu livro a apresentação e aplicação desta técnica, abordando tópicos como a situação histórica do Filtro de Kalman, explorando aspectos teóricos e práticos. Neste livro também pode-se encontrar uma demonstração das equações do processo de previsão e atualização sob uma ótica de mínimos quadrados, através do princípio da ortogonalidade.

Mesmo nos dias atuais, muitos autores, consideram esta técnica como uma metodologia de solução de problemas inversos simples e elegante, constituindo um estimador Bayesiano recursivo ótimo para uma determinada classe de problemas. Entretanto, essa mesma classe de problemas pode se mostrar restritiva em alguns momentos, uma vez que os problemas devem ser lineares e envolverem incertezas aditivas e Gaussianas.

Com o aumento no interesse na solução de problemas inversos de estimativa de estado não lineares e/ou que envolvam incertezas não Gaussianas, foram desenvolvidas novas técnicas de Filtragem Bayesiana das quais as mais utilizadas e bem aceitas são os métodos de estimativa Monte Carlo Sequencial, ou Filtro de Partículas. Uma descrição à respeito destas metodologias pode ser encontrada em RISTIC *et al.* [84], onde o embasamento matemático é estabelecido e implementado. Uma outra bibliografia considerada importante sobre o assunto, é o livro texto de KAIPIO e SOMERSALO [5], onde os autores apresentam a abordagem estatística de problemas inversos. Além de reapresentar os métodos clássicos de regularização, os autores apresentam alguns conceitos fundamentais associados à chamada Teoria de Inversão Estatística, como distribuições *a priori*, de verossimilhança e *a posteriori*, além de comentar diferentes Filtros Bayesianos e MCMC, em conjunto com alguns estudos de caso. Outra questão abordada pelos autores e fundamental para a área de Problemas Inversos é a questão do crime inverso, apresentada de modo formal, estabelecendo os motivos que levam à sua ocorrência, além de um conjunto de critérios para que este seja evitado.

Embora se mostre muito atrativa na solução de problemas inversos, técnicas como MCMC, logo tiveram suas limitações do ponto de vista de custo computacional observadas por vários autores. Com o aumento da complexidade dos problemas e do número de incógnitas, resolver o problema inverso pode se mostrar uma tarefa inviável. Utilizando esse ponto como motivação, a busca de alternativas para reduzir os tempos de processamento, foi abordado por alguns autores, sendo um dos exemplos o artigo de ORLANDE *et al.* [85]. Neste artigo, os autores, utilizam a interpolação por Funções de Base Radial (RBF), obtendo assim uma aproximação para a função de verossimilhança que, quando acoplada ao algoritmo de Metropolis-Hastings, permitiu determinar a solução do problema inverso até 35 vezes mais rápido em comparação com a função de verossimilhança original.

A estimativa de grande quantidade de variáveis de estado, utilizando o algoritmo de Filtro de Partículas parece ser uma questão que ainda gera divergências entre alguns autores [86–89]. Dentre esses podemos citar VASWANI [86] que argumenta que o aumento do número de variáveis de estado acima de 12 pode inviabilizar o uso do Filtro de Partículas. Porém, pode-se encontrar na literatura outros trabalhos, onde o Filtro de partícula é utilizado para números elevados de variáveis de estado.

Em [90], os Filtros SIR e ASIR foram utilizados em um problema de convecção natural, realizam a estimativa de um fluxo de calor aplicado na fronteira e variável com o tempo, onde o número de variáveis de estado chegou a 1324. Assim, este fato pode indicar que esta restrição não é válida necessariamente para todas as variáveis de estado, mas apenas para aquelas que também são incógnitas, uma vez que a evolução destas é modelada, por exemplo, através do processo de *random walk*.

## 2.6.2 Estimativa em problemas de mudança de fase

O armazenamento de energia térmica desempenha papéis importantes na conservação da energia solar e no aprimoramento da sua utilização. Sua importância reside na sua capacidade de reduzir a dependência das energias ditas não renováveis e do impacto ambiental que se cria. Como mencionando anteriormente, existem diversos métodos capazes de armazenar energia térmica, sendo o método por calor latente comprovadamente tido como o mais eficiente porque permite o armazenamento de uma enorme quantidade de energia em uma pequena massa/volume [91]. Para que ocorra esse armazenamento, uma mudança de fase é necessária.

Estudos de soluções para problemas de mudança de fase estão presentes na literatura desde o século XIX e consistem em problemas dependentes do tempo onde a posição do contorno deve ser determinada como uma função do tempo e do espaço. Problemas numéricos envolvendo mudança de fase, que exibem um movimento e uma interface bem acentuada entre as fases, são computacionalmente desafiadores e a exigência para controlar com precisão a interface de mudança de fase à medida que ela se move ao longo do domínio de dados discretos é a principal dificuldade neste caso. Esse tipo de problema tem estado presente nas aplicações de problemas inversos a muitos anos e ainda é um tema relevante.

A posição da interface de mudança de fase é amplamente estudada através de técnicas experimentais, mesmo essas sendo caras e difíceis de implementar. Dentre as formas experimentais pode-se destacar as medições por temperatura [92], monitoramento óptico [93], raios-x [94], ultra-som [95, 96].

Dado a essa dificuldade, surgem o interesse por técnicas menos dispendiosas, como as numéricas, em especial as utilizando as técnicas de problemas inversos. Em 2011, SILVA *et al.* [97] apresentaram a aplicação dos filtros SIR e ASIR em um problema de solidificação, onde os autores mostraram a melhor eficiência do filtro ASIR para a tarefa de estimar a fronteira de solidificação que variava com o tempo e o fluxo de calor.

Ainda em 2011, MAROIS *et al.* [98] desenvolvem um estudo para a estimativa de um processo de solidificação onde a frente de mudança de fase possui uma geometria complexa, sendo o processo de fusão e solidificação validado em instalações indus-



triais. Nesse estudo os autores utilizam o método de Levenberg-Marquardt, com medida não intrusivas e também propõe o desenvolvimento de um método quase 2D como um modelo reduzido onde validado com o modelo completo, obtendo boa concordância entre os métodos, sendo o segundo de mais rápida verificação computacional.

JACCOUD *et al.* [99] apresentaram os resultados para a estimativa de variáveis de estado, Temperatura e Concentração, e da frente de solidificação para o problema de Rubinstein com medida de temperatura, utilizando a técnica de filtro de partículas SIR. Os autores relatam uma boa concordância com o resultados obtidos pelo método em comparação a solução analítica de Rubinstein.

CHARIFI e ZEGADI [100] estudaram o processo de solidificação em uma geometria esférica utilizando o método de gradiente conjugado de Ribière-Polak, validando os seus resultados com uma solução exata e obtendo resultados para casos em que existem a presença de ruídos no fluxo, onde foi utilizado a regularização de Tikhonov.

### 2.6.3 Modelo Reduzido

Nas últimas décadas o rápido crescimento da capacidade de processamento de computadores possibilitou a solução numérica precisa de problemas complexos que antes só eram imagináveis, sendo observáveis tempos de processamento satisfatórios. Todavia, ainda se fazem presente vários exemplos de problemas onde o custo computacional mostra-se extremamente elevado, incluindo um grande conjunto de problemas inversos. A abordagem destes problemas utilizando modelos simplificados ou de malhas grosseiras, embora seja uma alternativa a esta barreira, pode incorrer em resultados de qualidade substancialmente inferior a desejada. Desta maneira, a busca de metodologias que ajudem a lidar com esta questão é um dos pontos que vêm sendo estudado ao longo dos últimos anos.

A técnica conhecida como Modelo de Erro de Aproximação (AEM)<sup>7</sup> foi proposta e formalizada inicialmente por KAIPIO e SOMERSALO [5], sendo introduzido através do exemplo da projeção de um modelo de evolução linear e Gaussiano, utilizando uma mais grosseira do que a original para a aplicação do AEM como o modelo reduzido. Neste trabalho também são apresentados outros exemplos como o problema de Tomografia por Impedância Elétrica.

Muitas áreas são beneficiadas com esta técnica, podendo ser observado que a aplicabilidade da técnica de AEM é extremamente versátil, encontrando-se em uma vasta gama de trabalhos, como as aplicações envolvendo a técnica de filtro de Kalman[101, 102].

ORLANDE *et al.* [103] apresentaram resultados para a estimativa de um fluxo

---

<sup>7</sup>Do inglês *Approximation Error Model* (AEM).

de calor aplicado na face de uma placa plana, utilizando medidas de temperatura transientes tomadas na outra face desta placa. A solução do problema inverso foi realizada através da técnica de Monte Carlo com Cadeia de Markov. O fluxo de calor foi considerado como função da posição e o problema de condução de calor tridimensional e não linear modelado foi simplificado a uma aproximação envolvendo um problema bidimensional e linear. Neste trabalho os autores fazem uso de duas metodologias: uma modificação do algoritmo de Metropolis-Hastings e o AEM. Foi apresentado os tempos computacionais sendo estes variando entre 50 e 100 horas, contra as 192 horas registradas para a solução do problema inverso com o modelo matemático completo, notando-se uma grande diferença no tempo para a resolução do modelo completo e o reduzido.

LAMIEN *et al.* [104] aplicam o algoritmo Liu & West de filtro de partículas em conjunto com a técnica de AEM para a solução de um problema inverso de estimativa de estado de transferência de bio-aquecimento. O problema de estudo tem como objetivo a estimativa da temperatura no tratamento de hipertermia de um tumor subcutâneo onde são adicionadas nanopartículas, assumindo que medidas de temperatura locais estão disponíveis. neste trabalho, as propriedades termofísicas e ópticas do modelo são modeladas como ruídos gaussianos e estimadas simultaneamente com o campo de temperatura.

Além da técnica de AEM que pode ser aplicada para a construção de modelos reduzidos, a técnica de Decomposição Ortogonal Própria (POD)<sup>8</sup> também é considerada como um método poderoso para a aproximação de baixa ordem de alguns processos de alta dimensão com boa acurácia [105].

Este método é amplamente utilizado nas situações em que a criação de um modelo reduzido é necessária. A característica mais favorável do método é a sua otimização: suas propriedades favoráveis sugerem que é uma maneira mais eficiente de usar em várias aplicações que podem tirar proveito da redução de dados ou extração de recursos, bem como a redução da dimensionalidade do problema, às vezes, um número surpreendentemente pequeno de “modos”[106].

Tida como sendo originalmente desenvolvida por PEARSON [105] em 1901 como uma ferramenta para análise gráfica, esta técnica foi várias vezes re-desenvolvida em vários campos, incluindo: processamento de sinal e teoria de controle, fluxo e dinâmica de fluidos, reconhecimento de rosto humano, identificação de processo, controle adaptativo, processamento de imagens, reconhecimento de padrões, dentre outros [107–110]. Dependendo da área de aplicação, o método é conhecido com vários nomes: decomposição Karhunen-Loève (KLD), Análise de Componente Principal (PCA) ou Decomposição de Valor Singular (SVD).

SHENEFELT *et al.* [111] aplica a técnica de SVD para a solução de um pro-

---

<sup>8</sup>Encontrada na literatura como *Proper Orthogonal Decomposition* - POD.

blema inverso de condução de calor unidimensional usando a matriz do princípio de Duhamel para a estimativa de um fluxo de calor imposto em um meio com a outra extremidade adiabática. Os resultados apresentados sugerem que a fluxo é estimado com boa acurácia para um ruído imposto de 10% da temperatura.

Em 2002, LIANG *et al.* [112] mostraram as conexões e equivalência de todos os três métodos (DKL, PCA, SVD), provando que todos esses nomes são praticamente arbitrários para o mesmo procedimento matemático. Desde a sua introdução, percebe-se que este método tem recebido muita atenção da comunidade científica, como uma ferramenta para analisar sistemas físicos complexos, sendo utilizado em diversos campos da ciência [106]. Na literatura pode-se encontrar alguns trabalhos relatando o sucesso desta técnica em conjunto com elementos finitos, volumes finitos e métodos de diferenças finitas para redução de modelo.

BIAŁECKI *et al.* [110] apresenta dois exemplos do uso da POD para a estimativa de um fluxo de calor na forma polinomial ( $\bar{q} = a + bx + cx^2 + dx^3 + ex^4$ ) em uma geometria cartesiana 2D, uma analítica ou pelo método dos elementos finitos. Neste trabalho os coeficientes do fluxo são considerados como constantes. Neste trabalho os autores estimam o fluxo de calor utilizando a técnica de Levenberg-Marquardt com três erros de medidas de temperatura (7, 50 e 100K). Os autores relatam que a técnica POD apresenta bons resultados para a estimativa do fluxo, sendo insensível aos erros impostos na medida de temperatura

OSTROWSKI *et al.* [106, 113, 114] relatam em seus trabalhos o método POD é uma ferramenta robusta para a estimativa de temperatura ou fluxos de calor. Entretanto, a aplicação dessa técnica requer que o campo de temperatura dependa linearmente do conjunto de parâmetros estimados, tornando este método não aplicável a uma grande classe de problemas inversos.

Em OSTROWSKI *et al.* [113] os autores aplicam a técnica de POD em conjunto com o Método de Superfície de Resposta (RSM) com a função radial multiquadrática inversa para a estimativa dos coeficientes de transferência de calor por convecção em um problema 2D, sem geração interna de calor. Outro exemplo de aplicação dessas técnicas está presente no mesmo trabalho para um problema de transferência de calor transiente. A técnica POD-RBF utilizada em conjunto da de Levenberg-Marquardt demonstrou bons resultados e os autores relatam que esta técnica pode ser facilmente aplicável em problemas com geometria complexa e em problemas onde há necessidade de se estimar os parâmetro simultaneamente.

ROGERS *et al.* [115] aplicam a técnica de POD-RBF em três problemas, sendo estes: condução de calor bidimensional, com o objetivo de estimar uma condutividade térmica espacialmente dependente; barra elástica linear tensionada, estimando os coeficientes dos materiais isotrópicos dentro de uma amostra de aço; por fim, um espécime compacto de tensão, relevante para a mecânica de fratura, estimando o

comprimento da rachadura de uma amostra sob um modo constante de modo 1. A função radial utilizada é a multiquadrática inversa, o método numérico é o de elementos finitos e é utilizado o método de Levenberg-Marquardt. Conclui-se que para os exemplos propostos neste trabalho, as propriedades e características dos materiais tiveram uma boa estimativa, mostrando que a técnica aplicada serve como uma boa técnica não destrutiva para a estimativa dos parâmetros desconhecidos do sistema.

## 2.7 Contribuições da Tese

Com base nos trabalhos aqui apresentados, pode-se concluir que a busca pelo melhor captação e armazenamento de energia é um dos temas em voga na comunidade científica, dando relevância ao tema. Além disso, a busca por aplicações que aprimorem os já conhecidos Materiais de Mudança de fase, melhorando sua capacidade para armazenamento de energia térmica é um tema que está sendo bastante aplicado de um ponto de vista experimental e modelos bidimensionais para o tratamento numérico destes, vêm surgindo aos poucos na literatura. Foram encontrados na literatura trabalhos cujos autores tiveram por objetivo a simulação numérica de um material nano-aprimorado passando por um processo de solidificação/fusão porém com o intuito de investigar a transferência de calor nesses materiais devido ao incremento de nanocompósitos. Pela revisão bibliográfica apresentada, observa-se que não foi tratado, até o presente momento, sendo até mesmo incipiente a questão do estudo do armazenamento de energia térmica, principalmente voltada para os estudos de estimativas de variáveis de estado para o armazenamento da energia acumulada, sendo o fluxo de calor necessário para isso tomado como fluxo de irradiação solar. Como estratégias de armazenamento de energia térmica, foi decidido adotar o método de armazenamento térmico via calor latente. O material escolhido como candidato a material de mudança de fase foi a parafina n-octacosane, com a adição de nanopartículas de cobre para a geração dos Materiais de Mudança de Fase Nanoestruturados abordados nesta tese, cujas suas propriedades serão apresentadas posteriormente.

Do ponto de vista da solução de problemas inversos, pode-se observar que os métodos de soluções baseados na inferência Bayesiana têm sido aplicados com sucesso em várias áreas do conhecimento. Vale ressaltar que técnicas como Filtros de Partículas e Monte Carlo com Cadeia de Markov têm um lugar de destaque, por serem robustas e de implementação relativamente simples. Nesta tese serão abordados o uso de 3 tipos de filtro de partículas, sendo eles: O filtro de Amostragem e Reamostragem por Importância (SIR), O filtro Auxiliar de Amostragem e Reamostragem por Importância (ASIR), que é uma extensão do filtro SIR e o filtro de LIU & WEST.

O procedimento POD-RBF surge como uma ferramenta poderosa para a criação de modelos reduzidos, possibilitando a aplicação da classe de problemas inversos em modelos que antes eram impensáveis pelo seu alto custo de processamento. Além disso, O AEM mostra-se também como ferramenta relevante para compensar diversos erros de modelagem típicos de modelos simplificados, permitindo assim, a redução do custo computacional da solução do problema inverso sem prejudicar a qualidade das estimativas.

# Capítulo 3

## Problemas Físicos e Formulações Matemáticas

O presente capítulo apresenta a descrição dos problemas diretos utilizados nesta tese, ou seja, apresenta o problema físico, bem como a formulação matemática adotada cada um deles. São estabelecidas hipóteses e apresentadas as condições de contorno e iniciais dos problemas em estudo, sendo estes o unidimensional e o bidimensional.

### 3.1 Problema Unidimensional

O problema proposto envolve o estudo dos processos de mudança de fase. A seguir serão apresentados o problema físico e o modelo que será utilizado para o processo de solidificação, seguido da sua respectiva solução por similaridade. Ao final desta seção será apresentada a solução do problema numérico pelo Método dos Volumes Finitos (MVF).

Durante a solidificação de suspensões coloidais, um número significativo de partículas irão ser rejeitadas para a fase líquida a partir do crescimento sólido (Fig. 3.1).

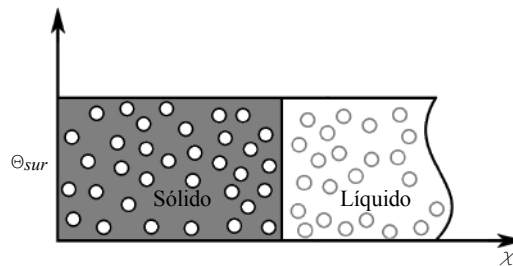


Figura 3.1: Modelo Físico do Processo de Solidificação.

### 3.1.1 Formulação Matemática

O problema em questão envolve a solidificação de um material de mudança de fase em domínio semi-infinito  $0 \leq x \leq \infty$ , inicialmente à uma temperatura homogênea  $T_0$ , maior que a temperatura de mudança de fase deste material e a uma Concentração de soluto uniforme  $C_l$ . Para os tempos iniciais  $t = 0$ , a temperatura da superfície deste domínio é resfriada e fixa a uma temperatura  $T_{sur}$  que é suficiente para iniciar a solidificação, de modo que, uma camada sólida  $x = s(t)$  cresce a partir de  $x = 0$ .

As equações de difusão para as regiões de sólido e líquido são fornecidas pelas seguintes equações:

$$\rho c_{ps} \frac{\partial T}{\partial t} = k_s \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad 0 < x < s(t) \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_s \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, \quad 0 < x < s(t) \quad (3.2)$$

$$\rho c_{pl} \frac{\partial T}{\partial t} = k_l \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad x > s(t) \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_l \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, \quad x > s(t) \quad (3.4)$$

$\rho$  denota a massa específica,  $c_p$  o calor específico,  $k$  a condutividade térmica,  $D$  a difusividade mássica e os sobrescritos  $s$  e  $l$  as fases líquida e sólida, respectivamente

As condições iniciais e de contorno são conhecidas e dadas por:

$$C = C_0 \quad T = T_0, \quad \text{em } x > 0, \quad t = 0 \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial C_s}{\partial x} = 0, \quad T = T_{sur} \quad \text{em } x = 0, \quad t > 0 \quad (3.6)$$

$$C_l \rightarrow C_0, \quad T \rightarrow T_0 \quad \text{quando } x \rightarrow \infty, \quad t > 0 \quad (3.7)$$

$$(3.8)$$

além disso,  $s = 0$  quando  $t = 0$ .

Supondo a existência da interface de mudança de fase em  $x = s(t)$ , tem-se nessa região

$$\rho L s(t) = k_s \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{s^-} - k_l \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{s^+} \quad (3.9)$$

$$[C(t, s^-) - C(t, s^+)] \dot{s}(t) = D_l \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{s^-} - D_s \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{s^+} \quad (3.10)$$

$$T(t, s^-) = T(t, s^+) = f_s C(t, s^-) + T_m = f_l C(t, s^+) T_m \quad (3.11)$$

### 3.1.2 Adimensionalização

O modelo básico e o método de solução utilizados e descritos a seguir, para o caso unidimensional, foram adotados a partir de [72]. No entanto, modificações das propriedades termofísicas/transporte para o NePCM sofreram novas adaptações, como as referidas por [29]. Os parâmetros adimensionais utilizados no presente estudo são os seguintes:

$$\mathcal{H} = \frac{H}{L_{mb}}, \quad \Theta = \frac{T - T_m - m_l C_0}{L_{mb}/\mathcal{C}_{p\_mbl}}, \quad \phi = \frac{C}{C_0}, \quad \chi = \frac{x}{l}, \quad \varsigma = \frac{s}{l}, \quad \tau = \frac{\alpha_{nl}^* t}{l^2},$$

$$\alpha = \frac{\alpha_{mbs}^*}{\alpha_{mbl}^*}, \quad \mathcal{D} = \frac{D_{mbs}}{D_{mbl}}, \quad \mathcal{C}_p = \frac{c_{p\_mbl}}{c_{p\_mbl}}, \quad \kappa = \frac{m_l}{m_s}, \quad Le = \frac{\alpha_{mbl}}{D_{mbl}}, \quad (3.12)$$

$$St = m_l C_0 \frac{c_{p\_mbl}}{L_{mb}}, \quad \Theta_{equ} = -St(1 - \phi_l).$$

O sobrescrito \* representa as quantidades dimensionais. Os subscritos *mb*, *s* e *l* indicam o material base, fases sólida e líquida, respectivamente.  $T$  é temperatura [K],  $\Theta$  é temperatura adimensional,  $T_m$  é temperatura de mudança de fase para o PCM puro ou solvente [K],  $l$  é uma escala de comprimento adequado [m],  $L$  é o calor latente [J/kg],  $c_p$  é o calor específico [J/kg·K],  $\mathcal{C}_p$  é o calor específico normalizada,  $C$  é a concentração de soluto [wt%],  $C_0$  é a concentração inicial [wt%],  $\phi$  é a concentração normalizada por  $C_0$ ,  $\varsigma$  é a localização da interface de mudança de fase,  $\tau$  é o tempo,  $\alpha^*$  é a difusividade térmica [m<sup>2</sup>/s],  $D$  é a difusividade mássica [m<sup>2</sup>/s],  $\mathcal{D}$  é a difusividade mássica normalizada de nanopartículas,  $\kappa$  é o coeficiente de segregação. Outras variáveis de interesse são  $m$  [K], que é a inclinação assumida da reta de *liquidus* ( $l$ ) ou de *solidus* ( $s$ ) do diagrama de fases (observe a Fig. 3.2),  $Le$  é o número de Lewis,  $St$  é o número de Stefan, e  $\Theta_{equ}$  é a temperatura adimensional de equilíbrio da linha de líquido no diagrama de fases.



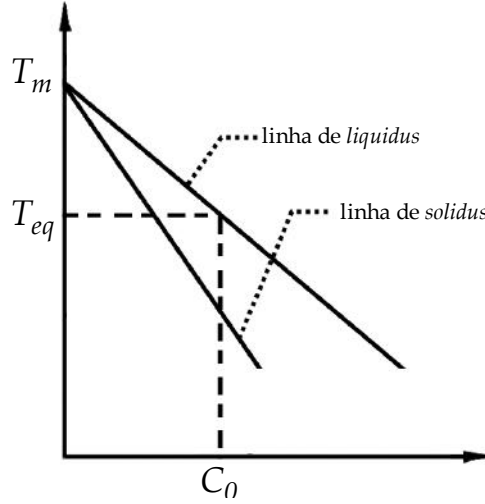


Figura 3.2: Diagrama de fases para um material puro.

### 3.1.3 Modelo Direto de Solidificação

A reformulação para o caso adimensionalizado do problema em questão, envolvendo a solidificação de um material de mudança de fase, torna-se agora descrito para o domínio semi-infinito  $0 \leq \chi \leq \infty$ , este inicialmente à uma temperatura homogênea  $\Theta_0$ , maior que a temperatura de mudança de fase deste material e a uma Concentração de soluto uniforme  $\phi_l$ . Para os tempos iniciais  $\tau = 0$ , a temperatura da superfície deste domínio é resfriada e fixa a uma temperatura  $\Theta_{sur}$  que é suficiente para iniciar a solidificação, de modo que, uma camada sólida  $\chi = \varsigma(\tau)$  cresce a partir de  $\chi = 0$ . As Figs. 3.3(a) e 3.3(b) apresentam respectivamente a distribuição de temperatura e concentração para o problema de solidificação de um material de duas fases.

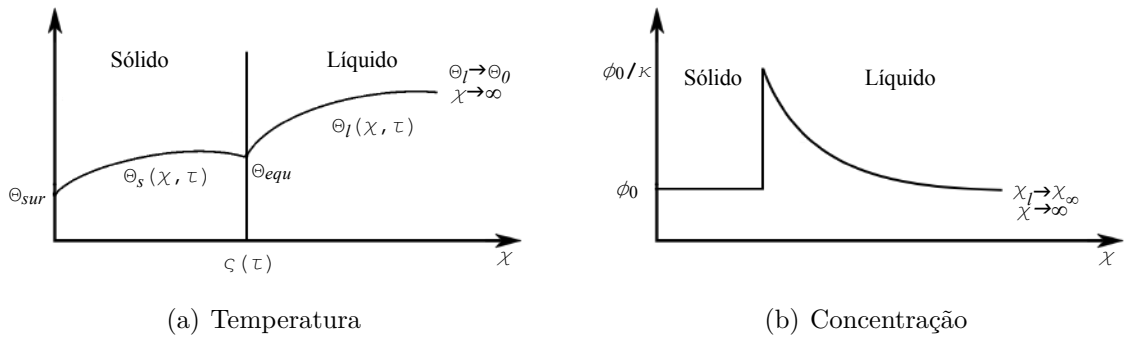


Figura 3.3: Solidificação em um meio semi-infinito.

## Equações Governantes

As equações de governo, seguindo ALEXIADES e SOLOMON [17], são fornecidas da seguinte maneira:

Equação de energia na região sólida:

$$\frac{\partial \Theta_s}{\partial \tau} = \alpha \frac{\partial^2 \Theta_s}{\partial \chi^2}, \quad 0 < \chi < \varsigma(\tau) \quad (3.13)$$

Equação de energia na região líquida:

$$\frac{\partial \Theta_l}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \Theta_l}{\partial \chi^2}, \quad \chi > \varsigma(\tau) \quad (3.14)$$

Equação da difusão de soluto na região sólida:

$$\frac{\partial \phi_s}{\partial \tau} = \frac{\mathcal{D}}{Le} \frac{\partial^2 \phi_s}{\partial \chi^2}, \quad 0 < \chi < \varsigma(\tau) \quad (3.15)$$

Equação da difusão de soluto na região líquida:

$$\frac{\partial \phi_l}{\partial \tau} = \frac{1}{Le} \frac{\partial^2 \phi_l}{\partial \chi^2}, \quad \chi > \varsigma(\tau) \quad (3.16)$$

As condições iniciais e de contorno adimensionais do PCM são os seguintes:

$$\phi = \phi_0 \quad \Theta = \Theta_0, \quad \text{em } \chi > 0, \quad \tau = 0 \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial \phi_s}{\partial \chi} = 0, \quad \Theta = \Theta_{sur} \quad \text{em } \chi = 0, \quad \tau > 0 \quad (3.18)$$

$$\phi_l \rightarrow \phi_0, \quad \Theta \rightarrow \Theta_0 \quad \text{quando } \chi \rightarrow \infty, \quad \tau > 0 \quad (3.19)$$

No movimento da interface sólido-líquido, existe, devido à divisão do soluto, um salto na concentração e a partir do diagrama de fases tem-se que:

$$\phi_s(\varsigma, \tau) = \kappa \phi_l(\varsigma, \tau) = \kappa \phi^i(\tau) \text{ em } \chi = \varsigma(\tau), \tau > 0 \quad (3.20)$$

onde  $\phi^i(\tau)$  é a concentração de líquido na interface. Além disso, a temperatura da interface é dada pela linha de liquidus, isto é,

$$\Theta^i(\tau) = \Theta_{equ}(\varsigma, \tau) = -St(1 - \phi^i(\tau)) \quad (3.21)$$

Desprezando o fluxo devido a mudanças de densidade, o balanço de energia (Condição de Stefan) e balanço de massa na interface sólido-líquido em  $\chi = \varsigma(\tau)$

pode-se escrever

$$\mathcal{C}_p \alpha \left. \frac{\partial \Theta}{\partial \chi} \right|_{\varsigma^-} - \left. \frac{\partial \Theta}{\partial \chi} \right|_{\varsigma^+} = \frac{d\varsigma}{d\tau} \quad (3.22)$$

$$\frac{\mathcal{D}}{Le} \frac{\partial \phi_\varsigma}{\partial \chi} - \frac{1}{Le} \frac{\partial \phi_l}{\partial \chi} = (1 - \kappa) \phi^i \frac{d\varsigma}{d\tau} \quad (3.23)$$

As soluções dos campos de temperatura e de concentração, juntamente com a posição instantânea da interface dependerá da razão de difusividades de massa ( $\mathcal{D}$ ), razão de calores específicos ( $\mathcal{C}_p$ ), coeficiente de segregação ( $\kappa$ ), o número de Lewis ( $Le$ ), o número Stefan ( $St$ ), razão de difusividade térmica ( $\alpha$ ), a temperatura da superfície não-dimensional ( $\Theta_{sur}$ ) e temperatura inicial não-dimensional ( $\Theta_0$ ).

### Solução por Similaridade

Uma análise completa de solidificação de suspensões coloidais de PCM devem responder pela transferência de massa das partículas. PEPPIN *et al.* [116] mostraram que durante a solidificação, suspensões coloidais podem se comportar semelhante a uma liga binária quando o tamanho de partícula é pequena. Outro aspecto do processo é a subresfriamento constitucional que se desenvolve devido à rejeição das nanopartículas antes da interface sólido-líquido.

O único caso em que o problema de Stefan exhibe uma solução analítica para o caso de solidificação da liga binária é para o caso de um domínio semi-infinito. Isto é conhecido como o problema Rubinstein [117]. VOLLER [72] explora o Problema de Rubinstein estendido de maneira que a fase líquida esteja inicialmente abaixo da temperatura de fusão do material.

A localização do movimento da interface pode ser calculadas a partir das seguintes equações:

$$\Theta_s = \Theta_{sur} + (\Theta^i - \Theta_{sur}) \frac{\text{erf} \left( \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \frac{\chi}{2\sqrt{\tau}} \right)}{\text{erf} \left( \frac{\lambda}{\sqrt{\alpha}} \right)} \quad (3.24)$$

$$\phi_s = \kappa \phi^i, \quad 0 < \chi < \varsigma(\tau), \quad \tau > 0 \quad (3.25)$$

$$\Theta_l = \Theta_0 + (\Theta^i - \Theta_0) \frac{\text{erfc} \left( \frac{\chi}{2\sqrt{t}} \right)}{\text{erfc}(\lambda)} \quad (3.26)$$

$$\phi_l = \phi_0 + (\phi^i - \phi_0) \frac{\operatorname{erfc}\left(\frac{\chi\sqrt{Le}}{2\sqrt{\tau}}\right)}{\operatorname{erfc}(\lambda\sqrt{Le})}, \quad \chi > \varsigma(\tau), \quad \tau > 0 \quad (3.27)$$

As três incógnitas nestas equações,  $\phi^i$ ,  $\Theta^i$  e  $\lambda$ , são calculadas sujeitas a satisfazer a condição de variação linear da concentração de líquido, Eq. (3.21), e as equações de interface (3.22). Substituindo a relação (3.28) para a condição de interface (3.22), obtém-se:

$$\varsigma(\tau) = 2\lambda\sqrt{(\tau)} \quad (3.28)$$

Combinando as Eqs. (3.13) a (3.16) com a condição inicial e com as condições de contorno (3.17), obtém-se as seguintes equações:

$$\sqrt{\pi}\lambda - \mathcal{C}_p\sqrt{\alpha} \frac{\Theta^i - \Theta_{sur}}{\operatorname{erf}\left(\frac{\lambda}{\sqrt{\alpha}}\right)} e^{-\frac{\lambda^2}{\alpha}} - \frac{\Theta^i - \Theta_0}{\operatorname{erfc}(\lambda)} e^{-\lambda^2} = 0 \quad (3.29)$$

$$(1 - \kappa)\phi^i\lambda\sqrt{Le}\sqrt{\pi}e^{\lambda^2Le}\operatorname{erfc}(\lambda\sqrt{Le}) - (\phi^i - \phi_0) = 0 \quad (3.30)$$

As Eqs. (3.21), (3.29) e (3.30) são resolvidas pelo Método de Newton para se obter as raízes  $\lambda$  e  $\phi^i$ , respectivamente.

### 3.1.4 Limitações do Modelo

O modelo apresentado pode ser considerado robusto e fácil de ser utilizado, não sendo computacionalmente caro, podendo ser resolvido com poucas iterações. Neste modelo as variações das propriedades das fases sólida e líquida podem ser apresentadas. Simultaneamente, o modelo adotado possui certas desvantagens como ser unidimensional e levar em consideração apenas a condução de calor e transferência de massa de nanopartículas, desprezando efeitos de convecção. Nesse modelo as partículas em suspensão são assumidas como sendo de tamanho único, sendo a aglomeração das partículas subsequentes ao início do processo ignorada [29].

Embora tradicionalmente a solução apresentada por RUBINSTEIN [75] seja sob a condição da temperatura inicial ser acima do valor da linha de *líquidus*, ou seja,  $\Theta_0 > 0$ , não existe nenhuma razão para que a linha de *líquidus* não possa ser sub-resfriada, de modo que  $\Theta_0 < 0$ . Em VOLLER [74], o autor, esclarece que duas soluções limite podem ser extraídas das Eqs. (3.28) - (3.30). No primeiro caso, se o coeficiente de partição for definido como  $\kappa = 1$  a concentração permanece fixa em

$\phi = 1$  e, assim, as Eqs. (3.28) - (3.30) se reduzem ao problema clássico de mudança de fase unidimensional para uma substância pura, relatado em CARSLAW e JAEGER [76]. Em um segundo momento, quando a temperatura da superfície é definida como a temperatura de interface,  $\Theta_{sur} = \Theta^i$ , a solução (3.28) - (3.30) reduz-se a solução para uma fusão super-resfriada em um domínio isolado.

### 3.1.5 Formulação pelo método da entalpia

Uma das dificuldades em resolver os problemas de mudança de fase está associado ao fato da temperatura ser constante na interface líquido-sólido. Isto faz com que a identificação da região de mudança de fase seja uma tarefa com um certo grau de dificuldade. Nestas situações, o emprego da equação da energia descrita pela temperatura não consegue resolver a região de mudança de fase, necessitando do emprego de artifícios matemáticos como na formulação em temperatura apresentada em SPARROW *et al.* [118]. Uma forma de suplantar esta dificuldade é escrever as equações diferenciais governantes em função de propriedades que não sejam constantes naquela posição. A variável termodinâmica entalpia, quando utilizada nas equações governantes, faz com que essa dificuldade seja suplantada, pois o valor da mesma não é constante através da interface mesmo para substâncias puras que mudam de fase a uma temperatura constante. A identificação da posição de interface pode ser obtida através da avaliação do valor da entalpia no domínio. Uma outra característica do método é o fato da malha computacional permanecer fixa, não havendo necessidade de adequações a medida que a interface avança.

O modelo de entalpia para um problemas de duas fases foi apresentado por CROWLEY e OCKENDON [73]. A entalpia em função das fases é dada por:

$$\mathcal{H} = \begin{cases} \Theta + 1 & \text{se } f_l = 1 \\ \Theta_{equ} + f_l & \text{se } 0 < f_l < 1 \\ \Theta_{equ} + C_p(\Theta - \Theta_{equ}) & \text{se } f_l = 0 \end{cases} \quad (3.31)$$

onde  $0 \leq f_l \leq 1$  é a fração de líquido. A concentração de soluto é dada pela regra de misturas

$$\phi^+ = f_l \phi_l + (1 - f_l) \phi_s \quad (3.32)$$

e o potencial de soluto é definido por

$$v = \frac{\phi^+}{f_l(1 - \kappa) + f_l} \quad (3.33)$$

A regra de mistura também é usada para a difusividade térmica e para a difusi-

vidade de massa [72], isto é,

$$\alpha^+ = f_l + (1 - f_l)\mathcal{C}_p\alpha \quad (3.34)$$

$$\mathcal{D}^+ = \frac{1}{Le} [f_l + \kappa(1 - f_l)\mathcal{D}] \quad (3.35)$$

Assim, um domínio único que rege as equações para calor e transporte de massa pode ser construído de acordo com as seguintes equações:

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \tau} = \nabla \cdot (\alpha^+ \nabla \theta), \quad \chi > 0 \quad (3.36)$$

$$\frac{\partial \phi^+}{\partial \tau} = \nabla \cdot (\mathcal{D}^+ \nabla v), \quad \chi > 0 \quad (3.37)$$

As Eqs. (3.36) e (3.37) são essencialmente as equações de governo apresentadas em CROWLEY e OCKENDON [73] com uma definição estendida para entalpia e  $\alpha^+$ , em termos da fração de líquido, permitindo assim o tratamento de resfriamento e um salto no calor específico. O campo de temperatura pode ser atualizado através da inversão da Eq. (3.31) da seguinte maneira:

$$\Theta_i = \begin{cases} \mathcal{H} - 1 & \text{se } f_l = 1 \\ \Theta_{equ} & \text{se } 0 < f_l < 1 \\ \frac{\mathcal{H} + (\mathcal{C}_p - 1)\Theta_{equ}}{\mathcal{C}_p} & \text{se } f_l = 0 \end{cases} \quad (3.38)$$

Note que quando  $f_l = 0$  o transporte da fase sólida Eqs. (3.13) e (3.15) são recuperados a partir de (3.36) e (3.37) e quando  $f_l = 1$  as equações da fase líquida, Eqs. (3.14) e (3.16) são recuperadas. CROWLEY e OCKENDON [73] observam que a Eq. (3.37) é o equivalente do soluto para a entalpia (Eq. (3.36)). Observe que  $\phi^+$  tem o mesmo papel da entalpia, saltando através da interface sólido-líquido e  $v^+$  tendo o mesmo papel da temperatura, sendo seccionalmente contínua através da interface [72].

### 3.1.6 Método dos Volumes Finitos

No problema direto, todas as propriedades termofísicas, condições de contorno e iniciais são conhecidas; o objetivo do problema direto é determinar os campos de temperatura e concentração no meio. O problema direto de transferência calor e massa acoplado unidimensional dado pelas Eqs. (3.13) - (3.16) foi resolvido, utilizando o método explícito de entalpia [73], onde a solução foi realizada através do Método dos Volumes Finitos (MVF). O MVF, de modo geral, é um método numérico baseado na integração da equação da equação governante em um volume de

controle de volume  $\Delta J$  [119], ilustrado pela Fig. 3.4.

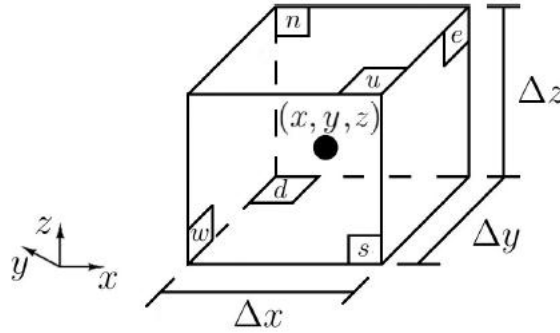


Figura 3.4: Volume de Controle.

Os valores pontuais de entalpia e concentração, localizados no centro de cada volume de controle utiliza como terminologia a referência aos pontos cardeais. Considera-se P o ponto localizado no centro do volume de controle considerado. Os centros dos volumes vizinhos na direção  $x$  são chamados de W (*West* ou Oeste) e E (*East* ou Leste), enquanto que na direção  $y$  são chamados de S (*South* ou Sul) e N (*North* ou Norte) e os na direção  $z$  são conhecidos como D (*Downward* ou Abaixo) e U (*Upward* ou Acima). Uma vista de uma malha unidimensional é apresentada em detalhes na Fig. 3.5.

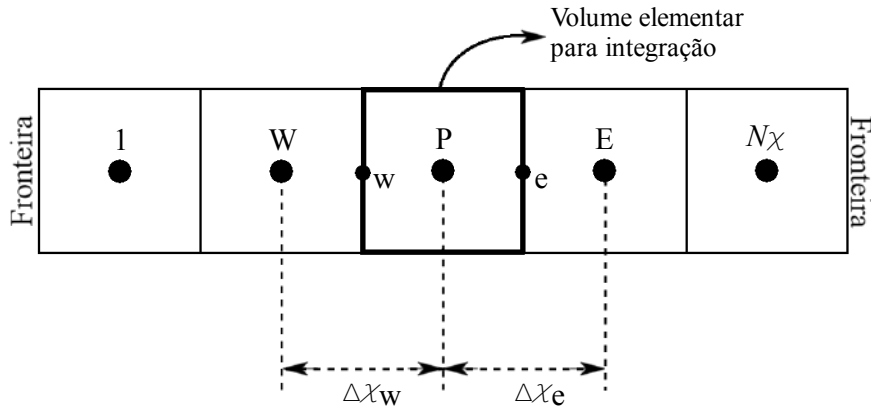


Figura 3.5: Malha para o problema unidimensional.

### Integração no Tempo

Nos problemas transientes, a solução pelo MVF envolve, além de uma integração ao longo do volume de controle, outro processo de integração no tempo, entre  $\tau$  e  $\tau + \delta\tau$ . A integração do termo transiente pode ser realizada de forma direta, de acordo com a Eq. (3.39), onde se assume que a entalpia  $\mathcal{H}_P$  em um ponto prevalece

sobre todo o volume de controle.

$$\int_{\Delta J} \left[ \int_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \tau} d\tau \right] dJ = (\mathcal{H}_P - \mathcal{H}_P^0) \Delta J \quad (3.39)$$

O mesmo pode ser realizado em termos da concentração, vide Eq. (3.40).

$$\int_{\Delta J} \left[ \int_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} \frac{\partial \phi}{\partial \tau} d\tau \right] dJ = (\phi_P - \phi_P^0) \Delta J \quad (3.40)$$

Para a consideração dos outros termos, se faz necessário estabelecer uma hipótese a respeito do comportamento das entalpias e concentrações nodais com o tempo. Pode-se utilizar os valores para essas variáveis no tempo  $\tau$ , no tempo  $\tau + \Delta\tau$  ou uma combinação linear destas. Independentemente da escolha realizada, é possível escrever o processo de integração de forma geral, contemplando as três opções apresentadas. Esta forma é apresentada pelas Eqs. (3.41) e (3.42).

$$I_{\Theta_{\mathcal{H}}} = \int_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} \mathcal{H}_P d\tau = [\theta \mathcal{H}_P + (1 - \theta) \mathcal{H}_P^0] d\tau \quad (3.41)$$

$$I_{\Theta_{\phi}} = \int_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} \phi_P d\tau = [\theta \phi_P + (1 - \theta) \phi_P^0] d\tau \quad (3.42)$$

$\theta$  pode assumir valores de 0 ou 1, dos quais ambos serão considerados neste trabalho.

Para os valores de  $\theta$  igual a 0, os valores nodais utilizados na discretização são avaliados no tempo anterior, sendo neste âmbito, a implementação mais fácil e um menor custo computacional. Entretanto, sua estabilidade é condicionada a um critério pré-estabelecido, fazendo com que o tamanho máximo possível de malha torna-se limitado pelo passo no tempo. Este esquema de solução recebe o nome de **Esquema Explícito**.

Quando  $\theta$  assume o valor 1, os valores nodais utilizados para a discretização são avaliados no tempo atual. Este esquema é incondicionalmente estável. Sua desvantagem é a necessidade de se resolver um sistema linear a cada passo no tempo, o que causa um aumento no custo computacional. Este esquema recebe o nome de **Esquema Implícito**.

### Solução do Método da Entalpia Explícito

O processo de solução deste modelo unidimensional começa com a aplicação do operador descrito na Eq. (3.43) nas Eqs. (3.36) e (3.37).

$$\int_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} \int_w^e (\cdot) d\chi d\tau \quad (3.43)$$



Utilizando o esquema explícito, a aplicação do operador de integração resulta nas Eqs. (3.44) e (3.45).

$$\mathcal{H}_P - \mathcal{H}_P^0 \Delta\chi = \left[ \alpha_e^+ \frac{\partial\Theta}{\partial\chi} \Big|_e - \alpha_w^+ \frac{\partial\Theta}{\partial\chi} \Big|_w \right] \Delta\tau \quad (3.44)$$

$$\phi_P - \phi_P^0 \Delta\chi = \left[ \mathcal{D}_e^+ \frac{\partial v}{\partial\chi} \Big|_e - \mathcal{D}_w^+ \frac{\partial v}{\partial\chi} \Big|_w \right] \Delta\tau \quad (3.45)$$

As derivadas parciais de primeira ordem resultantes são aproximadas através de diferenças centradas, ou seja,

$$\frac{\partial\Theta}{\partial\chi} \Big|_e = \frac{\Theta_E - \Theta_P}{\delta\chi_e} + \mathcal{O}(\delta\chi_e^2) \quad (3.46)$$

$$\frac{\partial v}{\partial\chi} \Big|_e = \frac{v_E - v_P}{\delta\chi_w} + \mathcal{O}(\delta\chi_w^2) \quad (3.47)$$

onde o termo  $\delta$  é formalmente utilizado para se descrever a distância entre dois nós na aproximação por diferenças finitas descrita acima. Isto é realizado supondo-se que o tamanho dos volumes adjacentes não são necessariamente iguais. Para malhas regulares, como é o caso deste estudo, pode-se tomar  $\delta\chi = \Delta\chi$ . O esquema de discretização resultante é formulado de acordo com as Eqs. (3.48) e (3.49) [119, 120].

$$\mathcal{H}_i^n = \mathcal{H}_i^{n+1} + \frac{\Delta\tau}{\Delta\chi^2} \left( \alpha_w^+ (\Theta_{i-1}^n - \Theta_i^n) + \alpha_e^+ (\Theta_{i+1}^n - \Theta_i^n) \right) \quad (3.48)$$

$$\phi_i^n = \phi_i^{n+1} + \frac{\Delta\tau}{\Delta\chi^2} \left( \mathcal{D}_w^+ (V_{i-1}^n - V_i^n) + \mathcal{D}_e^+ (V_{i+1}^n - V_i^n) \right) \quad (3.49)$$

onde  $\alpha^+$  e  $\mathcal{D}^+$  são representativos das difusividades na interface do volume, respectivamente.

O cálculo das difusividades nas fronteiras dos volumes de controle, necessária para o cálculo dos coeficientes do MVF, é realizado a partir dos valores conhecidos nos respectivos centros. Um processo do tipo média ponderada, embora seja uma opção simples e atrativa, pode não ser capaz de lidar com os diferentes valores destas propriedades. Uma alternativa com melhores resultados busca o valor que melhor representa o fluxo de calor que atravessa esta interface. Mostra-se [119] que, em uma análise unidimensional e em regime permanente, este valor de difusividade corresponde à média harmônica da difusividade dos dois centros, sendo o mesmo aplicado a difusividade neste trabalho. Este resultado é aplicado, com muito sucesso, em

diversos tipos de problemas, inclusive transientes e multidimensionais [119]. Desta forma, o cálculo das difusividades, nas interfaces, seguiu

$$\alpha_e^+ = \left[ \frac{2(f_i f_{i+1})}{(f_i + f_{i+1})} + \left( 1 - \frac{2(f_i f_{i+1})}{(f_i + f_{i+1})} \right) \alpha \right] \quad (3.50)$$

$$\mathcal{D}_e^+ = \frac{1}{Le} \left[ \frac{2(f_i f_{i+1})}{(f_i + f_{i+1})} + \kappa \left( 1 - \frac{2(f_i f_{i+1})}{(f_i + f_{i+1})} \right) \mathcal{D} \right] \quad (3.51)$$

onde  $f$  é equivalente a fração de líquido  $f_l$ .

As condições de contorno foram aplicadas segundo a técnica de meio-volume na fronteira [120].

## 3.2 Problema Bidimensional

### 3.2.1 Problema Físico

O problema proposto envolve um processo de mudança de fase sólido-líquido de um material de mudança de fase na presença de nanopartículas em uma geometria Cartesiana bidimensional (Fig. 3.6). O problema físico envolve convecção natural laminar de um fluido Newtoniano incompressível com propriedades térmicas constantes. O termo de empuxo será aproximado utilizando-se a hipótese de Oberbeck-Boussinesq [66, 71]. Portanto, a variação da massa específica na equação da continuidade será desprezada, enquanto que, no termo de empuxo, a massa específica é considerada como sendo função da temperatura.

As condições de contorno para as equações de conservação de quantidade de movimento em todas a superfície do corpo são de não-deslizamento e não-penetrabilidade, definindo desta forma, uma cavidade fechada. As condições de contorno para a equação a conservação de energia são de 2º tipo para todas as fronteiras, sendo três destas adiabáticas e a outra (em  $x = 0$ ) possuindo fluxo de calor variando no tempo e espaço  $\dot{q}(y, t)$ . O vetor gravidade é considerado paralelo ao eixo  $y$ , apontando na sua direção negativa.

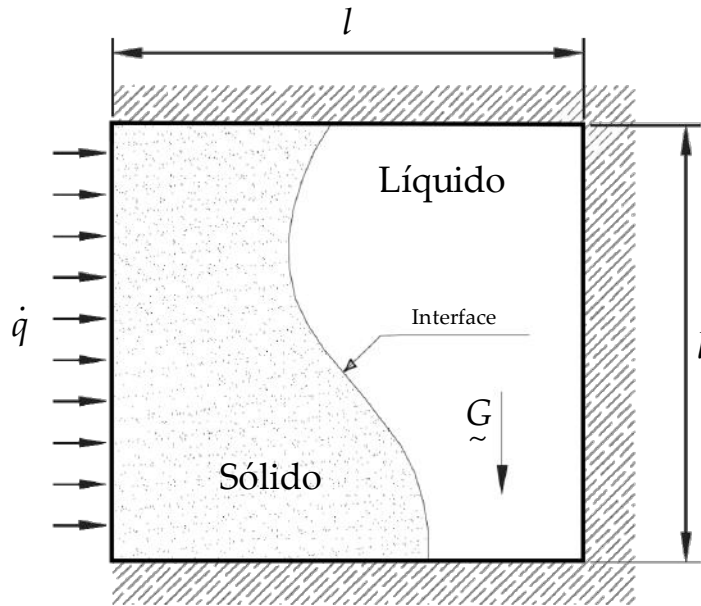


Figura 3.6: Esquema do problema de mudança de fase sólido-líquido em uma cavidade quadrada a um fluxo de calor incidindo em  $x = 0$ .

### 3.2.2 Modelo Matemático

A metodologia adotada tem como base o estudo desenvolvido por COLAÇO e DULIKRAVICH [71], onde os autores utilizam essa abordagem com o intuito de reduzir os desvios padrões da vorticidade no interior da região de líquido, bem como reduzir a área de líquido ao longo de todo o domínio. Esses mesmos autores anteriormente já haviam aplicado tal metodologia para o estudo numérico visando controlar automaticamente as características de um material submetido a solidificação através da aplicação de campo magnético externo [121]. Essa metodologia foi realizada partindo do modelo de zona de mistura proposto por VOLLER *et al.* [66] para a mudança de fase, a qual pode ser aplicada em problemas que envolvam materiais amorfos tais como a parafina.

As equações gerais de conservação para as fases líquida e sólida podem ser escritas como [66]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(g_s \rho_s \varphi_s) + \nabla \cdot (g_s \rho_s \mathbf{u}_s \varphi_s) = \nabla \cdot (g_s \Gamma_s^\varphi \nabla \varphi_s) + F_s + [\text{Termos Interfásicos}] \quad (3.52a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(g_l \rho_l \varphi_l) + \nabla \cdot (g_l \rho_l \mathbf{u}_l \varphi_l) = \nabla \cdot (g_l \Gamma_l^\varphi \nabla \varphi_l) + F_l - [\text{Termos Interfásicos}] \quad (3.52b)$$

Nas equações acima,  $\varphi$  é um escalar que representa a quantidade a ser conservada,  $g$  é a fração do volume de uma região representativa,  $\rho$  é a massa específica,  $\Gamma$  é o coeficiente de difusão,  $\mathbf{u}$  é o vetor de velocidade,  $F$  é a força de corpo, e os subscritos  $s$  e  $l$  referem-se as fases sólida e líquida, respectivamente. Nota-se que os termos fonte interfásicos têm sinais opostos e irão se anular em uma combinação aditiva das fases. As frações do volume de cada região ( $g_s$  e  $g_l$ ) estão relacionados com as frações mássicas de cada região respectiva ( $f_s$  e  $f_l$ ), por:

$$\rho f_s = \rho_s g_s \quad (3.53a)$$

$$\rho f_l = \rho_l g_l \quad (3.53b)$$

onde a massa específica de mistura local é definida como

$$\rho = \rho_s g_s + \rho_l g_l \quad (3.54)$$

A equação geral de conservação pode ser obtida pela soma das Eqs. (3.52) e (3.53). Assim, obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(g_s \rho_s \varphi_s + g_l \rho_l \varphi_l) + \nabla \cdot (g_s \rho_s \mathbf{u}_s \varphi_s + g_l \rho_l \mathbf{u}_l \varphi_l) = & \nabla \cdot (g_s \Gamma_s^\varphi \nabla \varphi_s + g_l \Gamma_l^\varphi \nabla \varphi_l) \quad (3.55) \\ & + F_s + F_l \end{aligned}$$

Para o modelo de zona de mistura proposto por VOLLER *et al.* [66], o sólido é assumido como estando completamente disperso no líquido, movendo-se na mesma velocidade

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_s = \mathbf{u}_l \quad (3.56)$$

A velocidade dentro da fase sólida é reduzida a um valor muito pequeno, impondo uma grande diferença de viscosidade entre as fases sólida e líquida, tal que

$$\frac{\mu_s}{\mu_l} \geq 10^5. \quad (3.57)$$

Assim, a Eq. (3.55) se reduz a

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(g_s \rho_s \varphi_s + g_l \rho_l \varphi_l) + \nabla \cdot [(g_s \rho_s \varphi_s + g_l \rho_l \varphi_l) \mathbf{u}] = \nabla \cdot (g_s \Gamma_s^\varphi \nabla \varphi_s + g_l \Gamma_l^\varphi \nabla \varphi_l) + \\ F_s + F_l \end{aligned} \quad (3.58)$$

Caso exista um equilíbrio entre as fases sólida e líquida, tais como  $\varphi_l = \varphi_s = \varphi$  em um volume representativo, como por exemplo na equação de energia escrita para a temperatura [71, 122], então aplicando a Eq. (3.54) na Eq. (3.58) tem-se

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varphi) + \nabla \cdot (\rho \varphi \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \varphi) + F \quad (3.59)$$

onde

$$\Gamma^\varphi = g_s \Gamma_s^\varphi + g_l \Gamma_l^\varphi \quad (3.60a)$$

$$F = F_s + F_l \quad (3.60b)$$

Para uma melhor utilização das relações propostas por esse modelo deve-se atentar ao diagrama de fases, que relaciona as três fases abordadas nesse modelo (sólido, líquido e zona de mistura<sup>1</sup>). Nesse diagrama, as regiões de líquido e de mistura são separadas por uma curva, chamada linha *liquidus*, que é simplificada neste diagrama por uma reta. Da mesma forma, a linha *solidus* é a linha que delinea as regiões de sólido e de mistura. Duas temperaturas são importantes neste diagrama: a primeira é a temperatura de fusão de uma substância pura, representada por  $T_m$  e a temperatura eutética,  $T_{eut}$ . A Temperatura eutética correspondente diretamente a concentração eutética,  $C_{eut}$ . A linha *liquidus* conecta o ponto de temperatura de fusão, onde a concentração equivale a zero, até o ponto de temperatura eutética com a concentração eutética. O diagrama de fases é apresentado no Fig. 3.7

---

<sup>1</sup>Aqui referida como alternativa ao uso de *Mushy zone*.

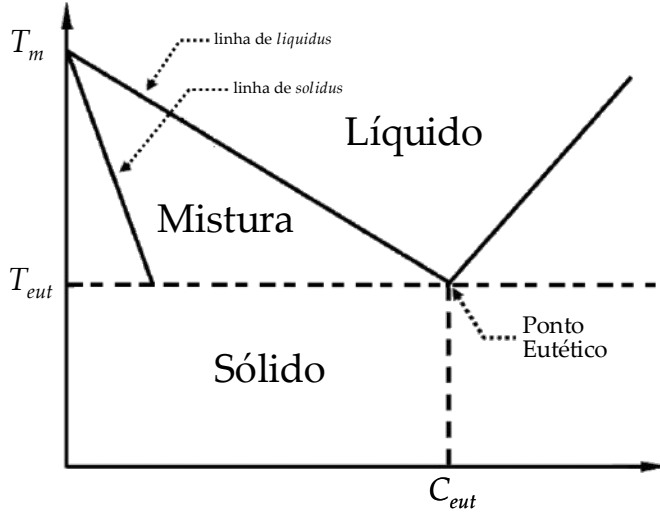


Figura 3.7: Diagrama de mudança de fase.

### Modelo para a Equação da Concentração

Para o modelo de concentração, as quantidades  $\varphi_s$  e  $\varphi_l$  devem seguir o diagrama binário e a Eq. (3.59) já não é válida. Nesta equação de conservação, deve-se usar a Eq. (3.58) em sua forma completa. De maneira a simplificar segue-se o proposto por VOLLER *et al.* [66], onde  $\rho_s = \rho_l$ . Segundo ZABARAS e SAMANTA [122], no contexto da solidificação, tal pressuposição implicará em um encolhimento induzido por solidificação. Assim, as Eqs. (3.53) e (3.58) segue que

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho(f_s \varphi_s + f_l \varphi_l)] + \nabla \cdot [\rho(f_s \varphi_s + f_l \varphi_l) \mathbf{u}] = \nabla \cdot (f_s \Gamma_s^\varphi \nabla \varphi_s + f_l \Gamma_l^\varphi \nabla \varphi_l) + F \quad (3.61)$$

Para a região de mistura, a concentração das fases líquida e sólida está relacionada através do coeficiente de partição,  $\kappa$ , ou seja

$$C_s = \kappa C_l \quad (3.62)$$

onde  $0 < \kappa < 1$ .

Substituindo a Eq. (3.62) na Eq. (3.61), reescrita em termos de concentração e sabendo que  $f_s = (1 - f_l)$ , segue-se que a nova equação para concentração é dada na forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho C_s) + \nabla \cdot (\rho C_s \mathbf{u}) = \nabla \cdot (D^+ \nabla C_s) - \frac{\partial}{\partial t} \left[ f_l \left( \frac{1}{\kappa} - 1 \right) \rho C_s \right] - \\ \nabla \cdot \left[ f_l \left( \frac{1}{\kappa} - 1 \right) \rho C_s \mathbf{u} \right] \end{aligned} \quad (3.63)$$

onde o coeficiente da difusividade é

$$D^+ = f_s \rho_s D_s + \frac{f_l \rho_l D_l}{\kappa}. \quad (3.64)$$

A Eq. (3.63) é a mesma equação proposta por em [66] no seu Modelo A. Entretanto, note que a Eq. (3.63) é válida somente para a região de mistura. Para as regiões de sólido e líquido se faz necessário se definir as seguintes expressões:

$$C = f_s C_s + f_l C_l \quad (3.65a)$$

$$D = f_s \rho_s D_s + f_l \rho_l D_l. \quad (3.65b)$$

A Eq. (3.65a) assume solidificação de equilíbrio. A solidificação de equilíbrio pressupõe uma mistura completa tanto na forma líquida quanto sólida, em cada estágio de resfriamento [71]. Usando as Eqs. (3.65) pode-se reescrever a Eq. (3.61) para a concentração como

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho C) + \nabla \cdot (\rho C \mathbf{u}) = & \nabla \cdot (D \nabla C) + \nabla \cdot [f_s \rho_s D_s \nabla (C_s - C)] + \\ & \nabla \cdot [f_l \rho_l D_l \nabla (C_l - C)] \end{aligned} \quad (3.66)$$

onde os dois últimos termos podem ser reescritos como o termo fonte

$$\mathcal{F}_C = \nabla \cdot [f_s \rho_s D_s \nabla (C_s - C)] + \nabla \cdot [f_l \rho_l D_l \nabla (C_l - C)]. \quad (3.67)$$

Neste termo, os valores dos coeficientes dependem das frações mássicas sólida e líquida,  $f_s$  e  $f_l$ , respectivamente. Nesta equação, a concentração das fases líquidas e sólidas devem ser determinadas seguindo uma dada temperatura. Considerando a linha *liquidus* como uma linha reta, pode-se obter as seguintes equações para a zona de mistura pelo diagrama binário da Fig. 3.2.

$$C_l = \frac{T_m - T}{T_m - T_{eut}} C_{eut} \quad (3.68a)$$

$$C_s = \frac{T_m - T}{T_m - T_{eut}} \kappa C_{eut} \quad (3.68b)$$

Observe que, dependendo da região, existem três valores diferentes para os coeficientes da Eq. (3.67), sendo estes resumidos na Tab. 3.1.

Tabela 3.1: Coeficientes para os termos fontes na equação de Concentração.

$f_s$	$f_l$	$C_s$	$C_l$
0	1	0	$C$
1	0	$C$	0
$0 < f_s < 1$	$(1 - f_s)$	Eq. (3.68b)	Eq. (3.68a)

Pode-se notar que a Eq. (3.66) reduz para Eq. (3.63) quando  $0 < f_s < 1$ . A fração de sólido pode ser modelada usando diferentes modelos, como a regra da alavanca, o modelo de Scheil (1942), ou o modelo de Clyne e Kurz (1981)[123]. Considera-se para fins deste estudo que a fração de sólido é uma mistura completa de ambas as fases sólida e líquida, assim a fração pode ser modela pela Regra da alavanca.

$$f_s = \frac{1}{1 - \kappa} \left( \frac{T_l - T}{T_m - T} \right) \quad (3.69)$$

Na Regra da alavanca deve-se determinar a temperatura de solidificação e fusão da mistura a uma determinada concentração. A linha *liquidus* é considerada como uma linha reta, podendo assim, obter a seguinte relação:

$$T_l = T_m - (T_m - T_{eut}) \frac{C}{C_{eut}} \quad (3.70a)$$

$$T_s = \max \left[ T_{eut}, T_m - (T_m - T_{eut}) \frac{C}{\kappa C_{eut}} \right] \quad (3.70b)$$

Quando o processo de solidificação tem início, a fase sólida rejeita soluto para o líquido. Assim, a concentração de nanopartículas no líquido restante, e especialmente nas regiões de mistura tendem a aumentar. Assim, as temperaturas de *solidus* e *liquidus* em cada ponto do domínio devem ser determinadas à medida que a frente de solidificação avança. Esse processo induz a um efeito de flutuabilidade na equação de Oberbeck-Boussinesq. A rejeição do soluto pelo sólido geralmente leva a reações secundárias, como a formação de óxidos, sulfetos, oxissulfetos, nitretos [71] e a uma possível aglomeração das nanopartículas durante a solidificação, que podem alterar significativamente os padrões de microsegregação [55, 66]. Tais reações não serão tratadas nesta tese.

## Modelo para a Equação de Energia

O problema de mudança de fase aqui descrito seguirá o mesmo abordado por COLAÇO e DULIKRAVICH [71], onde o método da entalpia é aplicado. Neste método, a equação energia é então escrita como uma combinação das equações de conservação de energia e temperatura. Reescrevendo a equação geral da conservação, Eq. (3.55)



em termos da entalpia ( $\varphi = h$ ), tem-se que:

$$\frac{\partial}{\partial t}(g_s \rho_s h_s + g_l \rho_l h_l) + \nabla \cdot (g_s \rho_s \mathbf{u}_s h_s + g_l \rho_l \mathbf{u}_l h_l) = \nabla \cdot (g_s k_s \nabla T_s + g_l k_l \nabla T_l) \quad (3.71)$$

Aplicando a hipótese, tal qual a aplicada para a velocidade, considera-se que a massa específica das fases sólida e líquida sejam constantes e iguais. Além disso, definindo

$$h = g_s h_s + g_l h_l \quad (3.72a)$$

$$k = g_s k_s + g_l k_l \quad (3.72b)$$

pode-se reescrever a equação de conservação de energia na forma de entalpia da seguinte maneira:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} h) = (k \nabla T). \quad (3.73)$$

Desta forma, é necessário obter uma relação entre a temperatura de equilíbrio e a entalpia da mistura a ser utilizada na Eq. (3.73). Para o caso de uma mistura binária, tem-se

$$T = \frac{h}{c_{ps}}, \quad \text{se} \quad h < h_s \quad (3.74)$$

$$T = \frac{h + T_s(c_{pl} - c_{ps}) - L}{c_{pl}}, \quad \text{se} \quad h > h_l \quad (3.75)$$

$$T = \frac{h + [T_s(c_{pl} - c_{ps}) - L](1 - f_s)}{c_{pl} + f_s(c_{ps} - c_{pl})}, \quad \text{se} \quad h_s < h < h_l \quad (3.76)$$

onde a fração de sólido  $f_s$  é dada pela Eq. (3.69), a regra da alavanca.

Na Tab. 3.1, os valores das frações mássicas e das propriedades térmicas do modelo são apresentadas na Tab.3.2. Note que para a região de mistura as propriedades térmicas são aproximadas através de funções lineares [29, 30, 72]. Para o calor específico especificamente será considerada a propriedade termodinâmica aproximada adotada em [66, 71].

Tabela 3.2: Propriedades térmicas em função da fração mássica na equação de Energia.

	$T < T_s$	$T > T_l$	$T_s < T < T_l$
$k$	$k_s$	$k_l$	$k_s f_s + (1 - f_s)k_l$
$\rho$	$\rho_s$	$\rho_l$	$\rho_s f_s + (1 - f_s)\rho_l$
$\mu$	$\mu_s$	$\mu_l$	$\mu_s f_s + (1 - f_s)\mu_l$
$c_p$	$c_{ps}$	$c_{pl}$	$\frac{\partial h}{\partial T}$

onde,

$$\frac{\partial h}{\partial T} \approx \frac{\sqrt{\left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial h}{\partial y}\right)^2}}{\sqrt{\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)^2}}. \quad (3.77)$$

Note que a entalpia é uma função da temperatura que é uma função da fração sólida, que por sua vez é uma função da temperatura. Assim, se  $h_s < h < h_l$ , um sistema não linear para  $T$  deve ser resolvido. Das Eqs. (3.68b), (3.69) e (3.76) segue-se que

$$T - \frac{h + [T_s(c_{pl} - c_{ps}) - L] \left[1 - \frac{1}{1 - \kappa} \left(\frac{T_l - T}{T_m - T}\right)\right]}{c_{pl} + \frac{1}{1 - \kappa} \left(\frac{T_l - T}{T_m - T}\right) (c_{ps} - c_{pl})} = 0 \quad (3.78)$$

para o modelo da regra de alavanca. A Eq. (3.78) pode ser resolvida para  $T$  pelo método secante.

Uma vez determinado  $T$  e, conhecendo-se o valor de  $C$ , os valores das concentrações nas fases líquida e sólida podem ser obtidas através do diagrama dado na Fig. 3.7. Após os cálculos de  $T$  e  $f_s$  as concentrações podem ser obtidas através da Tab. 3.1.

O código foi resolvido utilizando o Método dos Volumes Finitos com o método SIMPLEC sendo utilizado para as equações acopladas de pressão-velocidade. O esquema de interpolação adotado foi o WUDS para obter os valores de  $\mathbf{u}_x$ ,  $\mathbf{u}_y$ ,  $h$ , assim como para os seus derivados nas interfaces de cada volume de controle. O sistema linear resultante foi resolvido pelo método GMRES para acelerar a taxa de convergência iterativa. Para mais detalhes vide VOLLER *et al.* [66], COLAÇO e DULIKRAVICH [71], COLAÇO [124].

Em resumo, para a realização deste estudo e adoção deste modelo foram necessárias a adoção de algumas hipóteses. Neste problema foram consideradas as seguintes hipóteses:

- Escoamento laminar de um fluido incompressível;
- As propriedades físicas do fluido são constantes;
- Os termos de trabalho devido às forças de dissipação viscosa são desprezíveis;
- Não existem fontes ou sorvedores de massa no meio;
- Não existe geração de energia no meio;
- É válida a hipótese de Oberbeck-Boussinesq;
- O vetor de aceleração da gravidade é considerado paralelo ao eixo  $y$  e no sentido negativo do mesmo;
- Não são levados em consideração a aglomeração nem a segregação das nanopartículas;
- As propriedades termofísicas são aproximadas através de funções lineares;
- Não é considerado nenhum sorvedor devido à dissipação viscosa na região de mistura;
- Não utilizou-se nenhum refinamento malha computacional em relação à interface sólido/líquido para resolver os detalhes da região de mistura.

Com a utilização das hipóteses acima, apresenta-se na Tab. 3.3 as quantidades conservadas, os coeficientes de difusão e os termos fonte para as equações de conservação de massa, de quantidade de movimento e de energia, onde  $\mathbf{u}_x$  e  $\mathbf{u}_y$  são as componentes do vetor velocidade nas direções  $x$  e  $y$ ,  $\mu$  é a viscosidade,  $T$  é a temperatura,  $k$  é a condutividade térmica,  $c_p$  é o calor específico,  $P$  é a pressão,  $\beta_T$  é o coeficiente de expansão térmica,  $\beta_S$  é o coeficiente de expansão de soluto,  $G$  é o valor da aceleração da gravidade (considerada sempre paralela ao eixo ordenado  $y$ ) e  $T_{ref}$  é o valor da temperatura de referência, na qual são avaliadas as propriedades termofísicas do fluido. Observe que a aproximação de Boussinesq foi utilizada para a variação da densidade em relação à temperatura no termo de empuxo, que promove o movimento do fluido em casos envolvendo convecção natural. Note ainda que o termo fonte da equação de conservação de movimento na direção  $y$  engloba variações de temperatura e concentração, sendo um fator de acoplamento com a equação de conservação de energia e massa. Portanto, todos os campos de velocidade, temperatura e concentração devem ser determinados simultaneamente.

Tabela 3.3: Variáveis dependentes e parâmetros das equações de conservação.

Conservação de	$\varphi$	$\Gamma^\varphi$	$\mathcal{F}$
Massa	1	0	0
Espécies	$C$	$D$	$\nabla \cdot [f_s \rho_s D_s \nabla (C_s - C)] + \nabla \cdot [f_l \rho_l D_l \nabla (C_l - C)]$
x-momentum	$\mathbf{u}_x$	$\mu$	$-\frac{\partial p}{\partial x}$
y-momentum	$\mathbf{u}_y$	$\mu$	$-\frac{\partial p}{\partial y} - \rho G [1 - \beta_T (T - T_0) - \beta_S (C - C_0)]$
Energia	$h$	$k$	0

# Capítulo 4

## Problema de estimativa de estado

O presente capítulo tem por objetivo descrever as técnicas que serão utilizadas como metodologia no que compete a solução dos problemas inversos não estacionários, referidos como problemas de estimativa de estado. Serão apresentadas as técnicas de inferência Bayesiana, em particular as técnicas de filtro de partículas, de modelagem de erros e, por fim, será apresentada a técnica escolhida para a elaboração do modelo reduzido.

### 4.1 Problemas Inversos

Nos mais diversos campos da ciência existem aquelas variáveis que são de difícil mensuração. No âmbito físico, as leis físicas que regem esses tipos de fenômenos são geralmente formuladas em termos de equações diferenciais ordinárias ou diferenciais parciais, sendo que tais equações geralmente contêm parâmetros ou funções que, uma vez conhecidos, permitem o cálculo de grandeza(s) dependente(s), com o objetivo de descrever diversos tipos de fenômenos. Este tipo de problema é referido como Problema Direto e é classificado como *bem-posto*. Problemas inversos constituem parte de uma classe de problemas matematicamente classificados como *mal postos*, sendo um contraponto da classe dos Problemas Diretos. Para que um problema seja considerado bem posto, sua solução deve atender aos critérios apresentados abaixo [77]:

1. Existência;
2. Unicidade;
3. Estabilidade em relação aos dados de entrada.

Portanto, um problema que não satisfaça um ou mais destes critérios é classificado como mal posto. Embora a existência da solução possa ser garantida através

de argumentos físicos, matematicamente, sua unicidade não pode ser provada para todos os casos. Além disto, o problema inverso é muito sensível em relação aos dados de entrada, trazendo a necessidade do uso de determinadas técnicas para a obtenção de soluções que satisfaçam o critério de estabilidade [7].

#### 4.1.1 Inferência Bayesiana

Problemas inversos são comumente abordados como um problema de otimização, de modo que sua solução encontra-se sujeita às limitações impostas pelos métodos disponíveis. Entretanto, a eficiência destes métodos é fortemente afetada pela presença do caráter mal posto do problema. Na medida em que este número cresce (vários parâmetros ou funções), o caráter mal posto do problema torna-se evidente e o funcional regularizado proposto passa a apresentar vários mínimos locais, dificultando o uso de métodos de otimização baseados no gradiente. Métodos heurísticos, embora se apresentem como uma alternativa de fácil implementação, tem o custo de memória e tempo de processamento muito elevados.

A dificuldade ou impossibilidade de se incluir qualquer informação conhecida de antemão (*a priori*) na solução do problema inverso pode se mostrar uma forte deficiência, sobretudo em casos não estacionários, dessa maneira estudos envolvendo a Estatística Bayesiana tornaram-se naturalmente necessários. O ponto principal desta abordagem, como o próprio nome sugere, é o Teorema de Bayes, dado pela Eq. (4.1), onde  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{z}$  contém todas as incógnitas que devem ser estimadas e o conjunto de medidas experimentais que serão utilizadas no processo, respectivamente.

$$\pi(\mathbf{x}|\mathbf{z}) = \frac{\pi(\mathbf{z}|\mathbf{x})\pi(\mathbf{x})}{\pi(\mathbf{z})} \quad (4.1)$$

Este teorema permite que a modelagem das incertezas do processo experimental, codificada na função densidade de probabilidade (fdp) de verossimilhança  $\pi(\mathbf{z}|\mathbf{x})$ , seja combinada com a informação *a priori*, modelada na forma da fdp  $\pi(\mathbf{x})$ . Ao se combinar estas duas funções com a distribuição marginal das medidas experimentais  $\pi(\mathbf{z})$ , o resultado é também uma fdp, que quantifica a probabilidade de  $\mathbf{x}$  dado  $\mathbf{z}$ . Esta distribuição é conhecida como *posteriori*.

A abordagem Bayesiana, pode ser resumida em alguns princípios básicos descritos em [5], onde todas as variáveis incluídas no modelo são consideradas como variáveis aleatórias; a aleatoriedade descreve o grau de informação envolvendo os efeitos destas grandezas; este grau de informação envolvendo as grandezas de interesse é modelado através de distribuições de probabilidade. Assim, a solução do problema inverso é dada por inferência sobre a distribuição de probabilidade *a posteriori*.

Metodologias clássicas baseadas em técnicas de regularização produzem como resultado estimativas pontuais das grandezas de interesse, ao passo que a abordagem estatística tem como resultado uma distribuição que permite, por exemplo, determinar intervalos de confiança. Este aspecto é bastante importante, uma vez que o valor real da grandeza de interesse deixa de ter sentido, dando lugar a informação que se tem sobre a grandeza de interesse [5].

## 4.2 Problemas de Estimativa de Estado

Os problemas inversos não-estacionários, ou problemas de estimativa de estado, podem ser escritos na forma de modelos de evolução e de observação, no qual a evolução das variáveis desconhecidas é modelada como um processo dinâmico [5, 125].

Em um problema de estimativa de estado consideramos o seguinte modelo de evolução:

$$\mathbf{x}_n = \mathbf{f}_n(\mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{y}_n) \quad (4.2)$$

onde o vetor  $\mathbf{x}$  é o vetor de estado que contém todas as variáveis que serão estimadas. O subscrito  $n = 1, 2, \dots, N$ , representa o instante de tempo  $t_n$ ,  $\mathbf{f}$  uma função possivelmente não linear das variáveis de estado  $\mathbf{x}$  e do vetor de incertezas,  $\mathbf{y}$ , associados a essas variáveis.

Considerando medições  $\mathbf{z}_n^{med} \in \mathbb{R}^{\mathfrak{D}}$ , disponíveis para cada passo de tempo  $t_n, n = 0, 1, \dots, N$  o modelo de observação, o qual leva em conta a física do processo de medição e relaciona as medições com as variáveis de estado  $\mathbf{x}_n$  é descrito por:

$$\mathbf{z}_n = \mathbf{h}_n(\mathbf{x}_n, \hat{\mathbf{v}}_n), \quad (4.3)$$

$\mathbf{z}$  representa as medidas,  $\hat{\mathbf{v}} \in \mathbb{R}^{\mathfrak{D}}$ , representa as incertezas das medidas e  $D$  o número de medições.

O problema de estimativa de estado tem por objetivo obter informações sobre  $\mathbf{x}_n$  baseado nas Eqs. (4.2) e (4.3), e nas medições  $\mathbf{z}_n^{med}$  e está baseado nas seguintes hipóteses [5]:

- i) A sequência  $\mathbf{x}_n$  para  $n = 0, 1, \dots, N$  é um processo Markoviano de primeira ordem, isto é:

$$\pi(\mathbf{x}_{n+1} | \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}) = \pi(\mathbf{x}_{n+1} | \mathbf{x}_n) \quad (4.4)$$

- ii) A sequência  $\mathbf{z}_n$  para  $n = 0, 1, \dots, N$ , é um processo Markoviano com respeito

à história de  $\mathbf{x}_n$ , isto é:

$$\pi(\mathbf{z}_n | \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) = \pi(\mathbf{z}_n | \mathbf{x}_n) \quad (4.5)$$

iii) A sequência  $\mathbf{x}_n$  depende das observações passadas através de sua própria história, isto é:

$$\pi(\mathbf{x}_{n+1} | \mathbf{x}_n, \mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2, \dots, \mathbf{z}_n) = \pi(\mathbf{x}_{n+1} | \mathbf{x}_n) \quad (4.6)$$

Para o modelo de evolução e observação dado pelas Eqs. (4.2) e (4.3), respectivamente, também se supõem as seguintes hipóteses [103]:

- i) Para  $m \neq n$ , os ruídos de  $\mathbf{y}_m$  e  $\mathbf{y}_n$ , assim como de  $\hat{\mathbf{v}}_m$  e  $\hat{\mathbf{v}}_n$  são mutuamente independentes e mutuamente independentes do estado inicial  $\mathbf{x}_0$ .
- ii) Os ruídos dos vetores  $\mathbf{y}_m$  e  $\hat{\mathbf{v}}_n$  são mutuamente independentes para todos os valores de  $m \neq n$ .

Através das hipóteses usadas na construção do modelo de evolução, é possível realizar algumas operações algébricas no Teorema de Bayes [11]. O ponto de partida são algumas modificações triviais no teorema original, apresentadas na Eq. (4.7).

$$\begin{aligned} \pi(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_{0:n}) &= \frac{\pi(\mathbf{z}_{0:n} | \mathbf{x}_n) \pi(\mathbf{x}_n)}{\pi(\mathbf{z}_{0:n})} \\ &= \frac{\pi(\mathbf{x}_n, \mathbf{z}_{0:n})}{\pi(\mathbf{z}_{0:n})} \\ &= \frac{\pi(\mathbf{x}_n, \mathbf{z}_k, \mathbf{z}_{0:n-1})}{\pi(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{0:n-1})} \end{aligned} \quad (4.7)$$

O numerador desta equação pode ser simplificado, produzindo o resultado da Eq. (4.8)

$$\begin{aligned} \pi(\mathbf{x}_n, \mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{0:n-1}) &= \pi(\mathbf{z}_n | \mathbf{x}_n, \mathbf{z}_{0:n-1}) \pi(\mathbf{x}_n, \mathbf{z}_{0:n-1}) \\ &= \pi(\mathbf{z}_n | \mathbf{x}_n, \mathbf{z}_{0:n-1}) \pi(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_{0:n-1}) \pi(\mathbf{z}_{0:n-1}) \\ &= \pi(\mathbf{z}_n | \mathbf{x}_n) \pi(\mathbf{x}_n | \mathbf{z}_{0:n-1}) \pi(\mathbf{z}_{0:n-1}) \end{aligned} \quad (4.8)$$

Já o denominador é expandido, conforme mostra a Eq. (4.9).

$$\pi(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{0:n-1}) = \pi(\mathbf{z}_n | \mathbf{z}_n) \pi(\mathbf{z}_{0:n-1}) \quad (4.9)$$

Combinando os resultados das Eqs. (4.8) e (4.9) na Eq. (4.7), obtém-se a formu-



lação da *posteriori* dada pela Eq. (4.10).

$$\pi(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_{0:n}) = \frac{\pi(\mathbf{z}_n|\mathbf{x}_n)\pi(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_{0:n-1})}{\pi(\mathbf{z}_n|\mathbf{z}_{0:n-1})} \quad (4.10)$$

O Teorema de Bayes, assim, apresenta uma relação simples entre as distribuições de probabilidade apresentadas. Neste ponto, surge um conjunto de dificuldades. As mais evidentes são a determinação de  $\pi(\mathbf{z})$  e a dificuldade de manipulação algébrica da *posteriori*. As metodologias usadas na análise estatística de problemas inversos diferem entre si, entre outras coisas, pelo modo como abordam e solucionam estas e outras dificuldades.

Vários problemas podem ser considerados com os modelos de evolução e observação [5], por exemplo:

- i) O problema de previsão de estado cujo objetivo é estimar  $\pi(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_{1:n-1})$ , onde  $n > m$ ;
- ii) O problema de filtro de estado cujo objetivo é estimar  $\pi(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_{1:n})$ ;
- iii) O problema de suavização com retardo fixo, cujo objetivo é estimar  $\pi(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_{1:n+p})$ , onde  $p \geq 1$  é o retardo fixo;
- iv) O problema de suavização de domínio inteiro, cujo objetivo é estimar  $\pi(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_{1:n})$ , onde  $\mathbf{z}_{1:N}$  é sequência completa das medidas.

Como o problema de filtragem tem como objetivo a resposta em tempo real, assume-se que  $\pi(\mathbf{x}_0|\mathbf{z}_0) = \pi(\mathbf{x}_0)$  é uma informação conhecida *a priori* no instante inicial  $t_0$  e a distribuição *a posteriori*  $\pi(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_{1:n})$  passa a ser o objetivo do problema. O problema pode ser resolvido através de filtros Bayesianos em duas etapas, previsão e atualização, conforme ilustrado na Fig. 4.1.

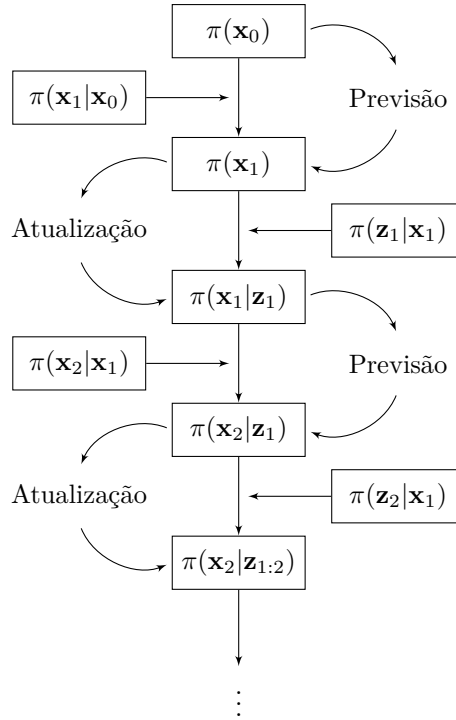


Figura 4.1: Processo de previsão e atualização de dados em estimativa de variáveis de estado. Adaptado de KAPIO e SOMERSALO [5]

Métodos Bayesianos incluem diversos algoritmos. No Capítulo 2 são descritos diferentes trabalhos que usam métodos como MCMC, filtro de Kalman e filtros de partículas. Os filtros de partículas constituem o método principal de estudo neste trabalho, para a estimação de variáveis de estado para o estudo dos fenômenos de solidificação e fusão de materiais de mudança de fase, na presença de nanopartículas, para o armazenamento de energia térmica.

### 4.3 Filtros de Partículas

Os filtros de partículas são um método de Monte Carlo para a solução de problema de estimativa de estado, no qual se procede à aproximação da densidade *a posteriori*, sem hipótese prévia sobre a forma dessa mesma.

A ideia básica do filtro de partículas consiste em representar a fdp *a posteriori* por um conjunto de amostras aleatórias chamadas de partículas, com pesos associados a elas, a fim de inferir sobre essa densidade a partir dessas amostras em conjunto com os pesos. Na teoria, quando o número de amostras aumenta indefinidamente, esta caracterização de Monte Carlo torna-se uma representação equivalente da função de densidade de probabilidade *a posteriori* e a solução se aproxima da estimativa Bayesiana ótima. Os algoritmos de filtro de partículas se utilizam geralmente de uma densidade de importância, a qual é uma densidade proposta para representar uma

densidade não explícita, que no caso em questão é a função de densidade de probabilidade *a posteriori*. Assim, amostras são geradas da densidade de importância em lugar da função de densidade de probabilidade *a posteriori* [9].

As partículas são os possíveis estados do processo, que podem ser representados como pontos no espaço de estado do processo, isto é  $\mathbf{x}_{0:n}^i$ ;  $i = 0, 1, \dots, N$ , onde  $N$  é o número de partículas do sistema. Cada amostra tem seus respectivos pesos definidos como  $w_n^i$ ;  $i = 0, 1, \dots, N$ ; Considerando o conjunto de todas as variáveis de estado até o instante  $t_n$ ,  $\mathbf{x}_{0:n} = \mathbf{x}_j$ ;  $j = 0, 1, \dots, N$  e com os pesos normalizados  $\sum_{i=1}^N w_n^i = 1$ , a distribuição *a posteriori* no instante  $t_n$  é aproximada da seguinte maneira [5, 84, 126]:

$$\pi(\mathbf{x}_{0:n}|\mathbf{z}_{1:n}) \approx \sum_{i=1}^N w_n^i \delta^d(\mathbf{x}_{0:n} - \mathbf{x}_{0:n}^i) \quad (4.11)$$

onde  $\delta^d(\cdot)$  é a função delta de Dirac. Retomando as hipóteses do problema de filtragem já descritas, a Equação (4.11), pode ser escrita como:

$$\pi(\mathbf{x}_{0:n}|\mathbf{z}_{1:n}) \approx \sum_{i=1}^N w_n^i \delta^d(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_n^i) \quad (4.12)$$

O cálculo dos pesos é obtido a partir da seguinte expressão [84]:

$$w_n^i \propto w_{n-1}^i \frac{\pi(\mathbf{z}_n|\mathbf{x}_n^i)\pi(\mathbf{x}_n^i|\mathbf{x}_{n-1}^i)}{q(\mathbf{x}_n^i|\mathbf{x}_{n-1}^i, \mathbf{z}_n)} \quad (4.13)$$

onde, para a derivação da Equação (4.13), a densidade de importância  $q(\mathbf{x}_n^i|\mathbf{x}_{n-1}^i, \mathbf{z}_{1:n})$  foi dada por  $q(\mathbf{x}_n^i|\mathbf{x}_{n-1}^i, \mathbf{z}_n)$ . Em outras palavras, a densidade de importância depende somente de  $\mathbf{x}_{n-1}^i$  e  $\mathbf{z}_n$ , ao invés de todo o histórico de cada partícula e das medidas. A escolha ótima da densidade de importância, que minimiza a variância dos pesos de importância condicionados em  $\mathbf{x}_{n-1}^i$  e  $\mathbf{z}_n$ , é fornecida por  $q(\mathbf{x}_n^i|\mathbf{x}_{n-1}^i, \mathbf{z}_n) = \pi(\mathbf{x}_n^i|\mathbf{x}_{n-1}^i, \mathbf{z}_n)$ . Entretanto, para a grande maioria dos problemas de interesse prático, esta escolha ótima, torna-se analiticamente intratável. Desta maneira, segundo RISTIC *et al.* [84], a densidade de importância é tomada como a densidade de transição, isto é,  $q(\mathbf{x}_n^i|\mathbf{x}_{n-1}^i, \mathbf{z}_n) = \pi(\mathbf{x}_n^i|\mathbf{x}_{n-1}^i)$ , de modo que a Equação (4.13) se reduz a:

$$w_n^i \propto w_{n-1}^i \pi(\mathbf{z}_n|\mathbf{x}_n^i) \quad (4.14)$$

Este algoritmo do filtro de partícula é conhecido como filtro de amostragem por importância sequencial (SIS) [127]. A aplicação sequencial do filtro de partículas pode resultar no fenômeno de degeneração. Isto é, após várias iterações, um número baixo de partículas possui peso importante e o conjunto de partículas não repre-

senta de maneira fiel a fdp a *posteriori* [84, 125]. Esse problema de degeneração implicaria que um grande esforço computacional fosse usado com o intuito de atualizar partículas com pesos insignificantes, cuja sua contribuição na aproximação da função de densidade de probabilidade *a posteriori* é quase nula. Este tipo de problema pode ser evitado com o aumento do número de partículas, ou de forma mais eficiente, selecionando-se as melhores partículas através de alguma técnica de reamostragem [9].

A reamostragem consiste em um mapeamento da medida aleatória  $\mathbf{x}_n^i, w_n^i$  em  $\mathbf{x}_n^{i*}, N^{-1}$  com pesos uniformes, onde é feita uma eliminação das partículas de baixo peso e uma replicação das partículas com pesos grandes [84, 125, 126, 128]. A Fig. 4.2 apresenta o processo da reamostragem, sendo: (1) partículas com peso uniforme no instante de tempo  $t = t_n$ ; (2) pesos das partículas atualizados após as medições; (3) partículas com peso pequeno descartadas e com maior peso dão origem a novas partículas próximas às regiões de maior probabilidade (reamostragem); e (4) partículas com pesos uniformes no instante de tempo  $t = t_{n+1}$ . Este processo de reamostragem pode ser feito para todos os instantes de tempo  $t_n$ .

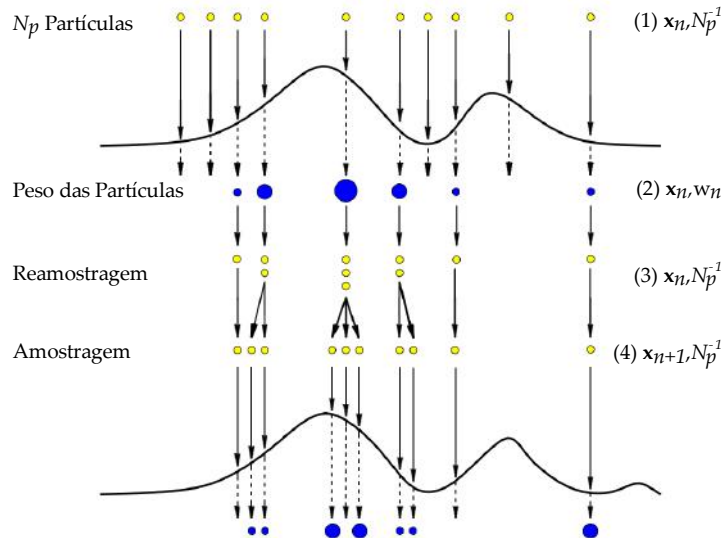


Figura 4.2: Desenho Esquemático do processo de reamostragem. Adaptado de RISTIC *et al.* [84]

Entretanto, o passo de reamostragem não acontece sem uma consequência na eficiência do filtro. Primeiramente, as possibilidades de paralelização são reduzidas, uma vez que todas as partículas devem ser combinadas. Outro problema inerente a esse passo é que as partículas com pesos maiores são selecionadas várias vezes, o que pode conduzir a uma perda de diversidade [125]. Esse problema é conhecido como empobrecimento das amostras, e é significativo nos processos com baixo nível de ruído no modelo de evolução [126]. Um caso típico de filtro que sofre deste problema

é o algoritmo de Amostragem e Reamostragem por Importância, conhecido como filtro SIR [125].

Neste trabalho as incertezas nas medidas são impostas como ruídos Gaussianos, aditivos, não correlacionados, com média zero e desvio padrão constante conhecido,  $\sigma$ . A função de verossimilhança para cada partícula  $\mathbf{x}_n^i$  pode ser expressa como [5, 84, 125]:

$$\pi(\mathbf{z}_n|\mathbf{x}_n^i) = (2\pi)^{-D/2}\sigma^{-D} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \frac{[\mathbf{z}_n^{med} - \mathbf{z}_n(\mathbf{x}_n^i)]^T [\mathbf{z}_n^{med} - \mathbf{z}_n(\mathbf{x}_n^i)]}{\sigma^2} \right\} \quad (4.15)$$

onde  $\mathbf{z}_n(\mathbf{x}_n^i)$  obtém-se do modelo de observação fornecido pela Eq. (4.3).

Neste ponto, vale enfatizar que a descrição do problema de estimativa de estado, em particular do problema de filtragem apresentado, considera os parâmetros não-dinâmicos do modelo que formam o vetor  $\boldsymbol{\theta}$  deterministicamente conhecido. Desta maneira os algoritmos do filtro SIR e do filtro ASIR permitem obter estimativas das variáveis de estado  $\mathbf{x}_n$ . Por outro lado, como poderá ser visto em seguida, o filtro de LIU & WEST, que é uma extensão do filtro ASIR, permite a estimativa simultânea dos parâmetros não-dinâmicos  $\boldsymbol{\theta}$  com as variáveis de estado  $\mathbf{x}_n$ .

#### 4.3.1 Filtro de Amostragem e Reamostragem por Importância (SIR)

O filtro Amostragem por Importância e Reamostragem Sequencial (Sequential Importance Resampling - SIR) é derivado do algoritmo SIS, no qual foi criada uma etapa adicional para evitar o problema de degeneração das partículas. Este fenômeno ocorre quando toda a amostra, exceto uma partícula, tem um peso muito pequeno após algumas evoluções do algoritmo do filtro de partícula padrão.

Com a degeneração, um grande esforço computacional precisa ser feito para atualizar as amostras que contribuem muito pouco para a aproximação de  $\pi(\mathbf{x}_n|\mathbf{z}_n)$ . Uma medida de degeneração do algoritmo do filtro de partícula, dada pelo tamanho amostral efetivo  $N_{ef}$  foi introduzida por BERGMAN [129] e LIU e CHEN [130], o qual é definido pela Eq. (4.16), sendo que para valores pequenos uma severa degeneração é constatada. Como o fenômeno da degeneração é indesejável, tem-se como objetivo tentar reduzi-lo e um modo de tentar redução, é escolher um valor elevado para o número de partículas ( $N$ ), o que é em muitos casos impraticável. Por isso, o modo mais comum de reduzir este efeito é a utilização da reamostragem, tal como relatado anteriormente e apresentado na Fig. 4.2.

Este procedimento foi inicialmente proposto por GORDON *et al.* [88], denominado filtro de partículas *bootstrap* (FPB), que ao amostrar proporcionalmente à verossimilhança, o filtro de partículas focaliza nas regiões da distribuição onde a ve-

rossimilhança é maior, ou seja, onde as boas aproximações significam possuir maior importância.

Como foi dito anteriormente, a ideia da reamostragem é eliminar as partículas com pequenos pesos normalizados. Desta forma, ocorre uma seleção pelas partículas de maior peso ou de maior importância. Uma medida da degeneração do algoritmo é o tamanho efetivo da amostra  $N_{ef}$  [131].

$$N_{ef} = \frac{N}{1 + \text{Var}(\mathbf{w}_n^i)} \quad (4.16)$$

Porém, é impossível avaliar precisamente  $N_{ef}$ . Então, utiliza-se uma aproximação  $\widehat{N}_{ef}$  para o valor de  $N_{ef}$ . Esta aproximação é dada por (KONG et al, 2000):

$$\widehat{N}_{ef} = \frac{1}{\sum_{i=1}^N (\mathbf{w}_n^i)^2} \quad (4.17)$$

A reamostragem pode ser realizada quando o tamanho amostral efetivo  $\widehat{N}_{ef}$  for menor que uma constante  $N_d$ , onde essa constante seria um indicador da ocorrência de degeneração. Portanto, a ideia básica da reamostragem é eliminar as amostras que têm um peso muito pequeno, mantendo apenas as amostras que têm um maior peso. O algoritmo do filtro SIR é apresentado na Tab. 4.1 na qual a reamostragem é realizada em todos os passos de tempo.

No filtro SIR, a densidade *a priori*  $\pi(\mathbf{x}_n^i | \mathbf{x}_{n-1}^i)$  é escolhida como densidade de importância. Como neste caso a densidade de importância é independente das observações  $\mathbf{z}_n^{med}$ , o espaço de estado é explorado sem nenhum conhecimento das observações. Portanto, no filtro SIR, a reamostragem reduz os efeitos de degeneração, mas como as amostras com pesos maiores são selecionadas muitas vezes, pode resultar em uma amostra final com uma grande quantidade de partículas repetidas, provocando um empobrecimento da amostra, que é bastante significativo quando o modelo de evolução de estado apresenta baixo nível de ruído [125]. Neste caso, ocorre o colapso de todas as partículas em uma única partícula em intervalos de tempo muito pequenos [126]. Segundo RISTIC *et al.* [84], o filtro auxiliar de partículas ou amostragem auxiliar e reamostragem por importância - ASIR introduzido por PITT e SHEPHARD [132], reduz o empobrecimento da amostra.

Tabela 4.1: Descrição das etapas do Filtro de Partículas SIR [84].

**Passo 1** - Inicialização

1. Faça  $n = 1$ ;
2. Tome um conjunto de partículas da distribuição inicial  $\mathbf{x}_n^i = \pi(\mathbf{x}_n | \mathbf{x}_{n-1})$ .

**Passo 2** - Avaliação dos pesos

1. Calcule os pesos  $w_n^i = \pi(\mathbf{z}_n | \mathbf{x}_n^i)$ ;
2. Normalize os pesos  $w_n^i = \frac{w_n^i}{\sum_{i=1}^N w_n^i}$ .

**Passo 3** - Reamostragem ou Seleção

1. Construa a soma dos pesos acumulativos

$$c_i = c_{i-1} + w_n^i, i = 1, \dots, N, c_0 = 0;$$

2. Faça  $i = 1$  e gere  $u_1$  de uma distribuição uniforme  $U[0, N^{-1}]$ ;
3. Para  $j = 1, \dots, N$ , faça:
  - (a) Calcule  $u_j = u_1 + N^{-1}(j - 1)$ ;
  - (b) Enquanto  $u_j > c_i$  faça  $i = i + 1$ ;
  - (c) Designe os índices  $i^j = i$

**Passo 4** - Cálculo da média *a posteriori* e desvio padrão

$$\bar{x}_n = \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_n^i w_n^i; \quad \sigma_n = \sqrt{\left(\frac{N}{N-1}\right) \sum_{i=1}^N w_n^i (\mathbf{x}_n^i - \bar{x}_n)}$$

**Passo 5** - Evolução do Modelo

1. Faça  $n = n + 1$ , se  $n = n_{final} + 1$ , então pare;
2.  $\mathbf{x}_n^i = \pi(\mathbf{x}_n | \mathbf{x}_{n-1}^{i^j})$  para  $i = 1, \dots, N$ .

**Retorne ao Passo 2.**

### 4.3.2 Filtro Auxiliar de Amostragem e Reamostragem por Importância (ASIR)

O filtro de partículas SIR descrito na seção anterior apresenta uma etapa de reamostragem que tenta evitar a degeneração das partículas. Porém, como visto anteriormente, esse processo pode gerar o empobrecimento da amostra. [11] afirma que a utilização de um número finito de partículas é insuficiente para tentar prever o comportamento da cauda da densidade de probabilidade, o que se torna mais grave quando os *outliers* são inexistentes. PITT e SHEPHARD [132], como uma maneira de tentar evitar este problema, introduziram uma variante do filtro SIR, que é o filtro de Amostragem Auxiliar e Reamostragem por Importância (ASIR), no qual é feita uma tentativa de minimizar a perda da diversidade ao realizar a reamostragem no passo de tempo  $t_{n-1}$  com base nas medidas disponíveis no tempo  $t_n$ . Em outros termos, a ideia do filtro ASIR é de mimetizar a disponibilidade da densidade de importância ótima  $\pi(\mathbf{x}_n^i | \mathbf{x}_{n-1}^i, \mathbf{z}_n)$  [133]. Neste caso, a reamostragem é baseada em uma estimativa pontual  $\mu_n^i$  que caracteriza  $\pi(\mathbf{x}_n^i | \mathbf{x}_{n-1}^i)$ , a qual pode ser a média, a moda de  $\pi(\mathbf{x}_n^i | \mathbf{x}_{n-1}^i)$  ou uma amostra de  $\pi(\mathbf{x}_n^i | \mathbf{x}_{n-1}^i)$  [84]. No entanto, se os ruídos do modelo de evolução são de pequenas magnitudes, então  $\pi(\mathbf{x}_n^i | \mathbf{x}_{n-1}^i)$  é geralmente bem definida por  $\mu_n^i$ , de modo que os pesos sejam comparáveis, tornando assim o filtro ASIR menos sensível às discrepâncias do que o filtro SIR [125]. Por outro lado, se os ruídos no modelo de evolução são de grandes magnitudes, a estimativa pontual  $\mu_k^i$  pode não ser uma boa caracterização de  $\pi(\mathbf{x}_n^i | \mathbf{x}_{n-1}^i)$ , o que pode resultar em uma perda de eficiência [125]. O algoritmo do filtro ASIR é apresentado na Tab. 4.2.

Tabela 4.2: Descrição das etapas do Filtro de Partículas ASIR.

<p><b>Passo 1</b> - Inicialização</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Gere <math>\mathbf{x}_n^i</math> para <math>i = 1, \dots, N</math> a partir da densidade <i>a priori</i> <math>\pi(\mathbf{x}_n   \mathbf{x}_{n-1}^i)</math> e calcule <math>\mu_n^i = \mathbb{E}[\mathbf{x}_n   \mathbf{x}_{n-1}^i]</math>;</li> </ol> <p><b>Passo 2</b> - Avaliação dos pesos</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Usando a função de verossimilhança calcule <math>w_n^i = \pi(\mathbf{z}_k   \mu_n^i) w_{n-1}^i</math>;</li> <li>2. Normalize os pesos <math>w_n^i = \frac{w_n^i}{\sum_{i=1}^N w_n^i}</math>.</li> </ol>
---



**Passo 3** - Reamostragem ou Seleção

1. Construa a soma dos pesos acumulativos

$$c_i = c_{i-1} + w_n^i, i = 1, \dots, N, c_0 = 0;$$

2. Faça  $i = 1$  e gere  $u_1$  de uma distribuição uniforme  $U[0, N^{-1}]$ ;
3. Para  $j = 1, \dots, N$ , faça:
  - (a) Calcule  $u_j = u_1 + N^{-1}(j - 1)$ ;
  - (b) Enquanto  $u_j > u_i$  faça  $i = i + 1$ ;
  - (c) Designe os índices  $i^j = i$ .

**Passo 4** - Amostragem

1. Gere  $\mathbf{x}_n^j$  a partir da densidade *a priori*  $\pi(\mathbf{x}_n | \mathbf{x}_{n-1}^{i^j})$ ;
2. Com a função de verossimilhança, calcule os novos pesos

$$w_n^j = \frac{\pi(\mathbf{z}_n | \mathbf{x}_n^j)}{\pi(\mathbf{z}_n | \mu_n^{i^j})}.$$

**Passo 5** - Avaliação dos novos pesos

1. Normalize os pesos  $w_n^j = \frac{w_n^j}{\sum_{j=1}^N w_n^j}$ .

**Passo 6** - Cálculo da média *a posteriori* e desvio padrão

$$\bar{x}_n = \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_n^i w_n^i; \quad \sigma_n = \sqrt{\left(\frac{N}{N-1}\right) \sum_{i=1}^N w_n^i (\mathbf{x}_n^i - \bar{x}_n)^2}.$$

**Passo 7** - Evolução do Modelo

1. Faça  $n = n + 1$ , se  $n = n_{final} + 1$ , então pare;
2.  $\mathbf{x}_n^i = \pi(\mathbf{x}_n | \mathbf{x}_{n-1}^i)$  para  $i = 1, \dots, N$ .

**Retorne ao Passo 2.**

### 4.3.3 Filtro de LIU & WEST

A estimativa de parâmetros em conjunto com a estimativa de variáveis de estado nos filtros de partículas SIR e ASIR são possíveis desde que o vetor dos parâmetros  $\boldsymbol{\theta}$ , seja tratado como uma variável de estado. LIU e WEST [12] propõe a estimativa combinada dos parâmetros não dinâmicos com as variáveis de estado, generalizando o filtro ASIR com estimativa de parâmetros, de modo que inferência é feita sobre a densidade *a posteriori* conjunta  $\pi(\mathbf{x}_n, \boldsymbol{\theta} | \mathbf{z}_{1:n})$ , onde  $\boldsymbol{\theta}$  é o vetor de parâmetros e  $\mathbf{x}_n$  as variáveis de estado.

O filtro de LIU & WEST é baseado na hipótese de WEST [134] de mistura de Gaussianas, na qual se assume para o vetor de parâmetros não-dinâmicos  $\boldsymbol{\theta}$  [135]:

$$\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{z}_n) \approx \sum_{i=1}^N \pi_N(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{m}_n^i, \hbar^2 \widetilde{\mathbf{V}}_n) \quad (4.18)$$

onde  $\pi_N(\boldsymbol{\theta}; \boldsymbol{\alpha}, \mathbf{W})$  é a densidade normal multivariada com média  $\boldsymbol{\alpha}$  e com matriz de covariância  $\mathbf{W}$ . Assim, as amostras  $\boldsymbol{\theta}_n^i$ ;  $i = 1, \dots, N$  aproximam a densidade  $\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{z}_n)$ ,  $\widetilde{\mathbf{V}}_n$  aproxima a variância de  $\boldsymbol{\theta}$  dado  $\mathbf{z}_n$ ,  $\hbar^2$  é um fator de suavização e  $\mathbf{m}_n^i$  é uma modificação dos parâmetros determinada pelas partículas dos parâmetros  $\boldsymbol{\theta}$  e sua média  $\bar{\boldsymbol{\theta}}$ , isto é [12]:

$$\mathbf{m}_n^i = \hat{A} \boldsymbol{\theta}_n^i + (1 - \hat{A}) \bar{\boldsymbol{\theta}} \quad (4.19)$$

onde  $\bar{\boldsymbol{\theta}}$  é a média dos parâmetros  $\boldsymbol{\theta}$  no instante  $n$  e  $\hat{A}$  é o fator de redução, definido por:

$$\hat{A} = \frac{3\delta - 1}{2\delta} \quad (4.20)$$

Note que o filtro de LIU & WEST depende da escolha do parâmetro de sintonização  $\delta$ , que geralmente é tomado como  $0,95 < \delta < 0,99$  [12]. O fator de suavização  $\hbar$  depende também do fator de redução, da seguinte maneira:

$$\hbar^2 = 1 - \hat{A}^2 \quad (4.21)$$

Nota-se também que as estatísticas *a posteriori* a cada instante de tempo  $t_n$  são realizadas com base nas amostras e pesos dos passos 3, 5 e 7 respectivamente para os algoritmos do filtro SIR, ASIR e LIU & WEST.

Assim, as estimativas são caracterizadas pela média, pelo desvio padrão. O Intervalo de confiança pode ser definido pela seguinte expressão, assumindo um grau de confiança de 99% [83]:

$$\mathbf{x} = \hat{\mathbf{x}}_{est} \pm 2,576 \sigma_{\hat{\mathbf{x}}_{est}} \quad (4.22)$$

A Tab. 4.3 apresenta o algoritmo de filtro de partículas para estimativa combinada de parâmetros e variáveis de estado no passo de tempo  $t_{n-1}$ , com base nas medidas disponíveis no tempo  $t_n$ .

Tabela 4.3: Descrição das etapas do Filtro de Partículas LIU & WEST [12].

**Passo 1** - Inicialização

1. Faça  $\delta \in [0, 95; 0, 99]$ ;
2. Faça  $\hat{A}$  através da Equação (4.20);
3. Faça  $\hat{h}^2$  através da Equação (4.21);
4. Faça  $n = 1$ ;
5. Gere  $\mathbf{x}_n^i$  para  $i = 1, \dots, N$  a partir da densidade *a priori*  $\pi(\mathbf{x}_n|\mathbf{x}_{n-1}^i)$  e calcule  $\mu_n^i = \mathbb{E}[\mathbf{x}_n|\mathbf{x}_{n-1}^i, \boldsymbol{\theta}_{n-1}^i]$  e  $\mathbf{m}_{n-1}^i$  através da Equação (4.19).

**Passo 2** - Avaliação dos pesos

1. Usando a função de verossimilhança calcule  $w_n^i = \pi(\mathbf{z}_n|\mu_n^i, \mathbf{m}_{n-1}^i)w_{n-1}^i$ ;
2. Normalize os pesos  $w_n^i = \frac{w_k^i}{\sum_{i=1}^N w_n^i}$ .

**Passo 3** - Reamostragem ou Seleção

1. Construa a soma dos pesos acumulativos

$$c_i = c_{i-1} + w_n^i, i = 1, \dots, N, c_0 = 0;$$

2. Faça  $i = 1$  e gere  $u_1$  de uma distribuição uniforme  $U[0, N^{-1}]$ ;
3. Para  $j = 1, \dots, N$ , faça:
  - (a) Calcule  $u_j = u_1 + N^{-1}(j - 1)$ ;
  - (b) Enquanto  $u_j > c_i$  faça  $i = i + 1$ ;
  - (c) Designe os índices  $i^j = i$ .

**Passo 4** - Amostragem

1. Gere  $\boldsymbol{\theta}_{n-1}^j$  para  $j = 1, \dots, N$  a partir de  $N(\boldsymbol{\theta}_n^j|\boldsymbol{\theta}_{n-1}^{i^j}, \hat{h}^2\tilde{\mathbf{V}}_{n-1})$ ;
2. Gere  $\mathbf{x}_n^j$  a partir da densidade *a priori*  $\pi(\mathbf{x}_n|\mathbf{x}_{n-1}^{i^j}, \boldsymbol{\theta}_n^j)$ ;
3. Com a função de verossimilhança, calcule os novos pesos

$$w_n^j = \frac{\pi(\mathbf{z}_n|\mathbf{x}_n^j, \boldsymbol{\theta}_n^j)}{\pi(\mathbf{z}_n|\mu_n^{i^j}, \mathbf{m}_{n-1}^{i^j})}.$$

4. Para  $j = 1, \dots, N$ , faça:
  1. Calcule  $u_j = u_1 + N^{-1}(j - 1)$ ;
  2. Enquanto  $u_j > c_i$  faça  $i = i + 1$ ;
  3. Designe os índices  $i^j = i$ .

**Passo 5** - Avaliação dos novo pesos

1. Normalize os pesos  $w_n^j = \frac{w_n^j}{\sum_{j=1}^N w_n^j}$ .

**Passo 6** - Cálculo da média *a posteriori* e desvio padrão

$$\bar{x}_n = \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_n^i w_n^i; \quad \sigma_n = \sqrt{\left(\frac{N}{N-1}\right) \sum_{i=1}^N w_n^i (\mathbf{x}_n^i - \bar{x}_n)^2}.$$

**Passo 7** - Evolução do Modelo

1. Faça  $n = n + 1$ , se  $n = n_{final} + 1$ , então pare;
2.  $\mathbf{x}_n^i = \pi(\mathbf{x}_n | \mathbf{x}_{n-1}^i)$  para  $i = 1, \dots, N$ .

**Retorne ao Passo 2.**

## 4.4 Modelo de Erro

A relação existente entre uma boa modelagem de um problema com a complexidade que um modelo matemático completo exige é uma relação direta, vista tanto por argumentos teóricos quanto empíricos, sendo que essa complexidade é responsável pela melhor qualidade nos resultados obtidos - uso de um bom equipamento, com calibração adequada, ao realizar um experimento, quanto ao tamanho de malha utilizada e o esforço computacional despendido na resolução de problemas numéricos. Em consequência disso, o usuário que deseja realizar simulações computacionais se vê com frequência quantificado ao custo benefício que envolve o aumento de custo computacional e da precisão desejada em seus resultados.

Especificamente em soluções de problemas inversos o custo computacional é geralmente alto, impondo assim, limitações severas no estudo de uma vasta gama de situações. Com o passar dos anos algoritmos voltados para lidar com este tipo de problema vêm sendo desenvolvidos, dentre os quais tem obtido bastante destaque na literatura a técnica conhecida como Modelo de Erro de Aproximação (AEM), de KAPIO e SOMERSALO [5]. Diferentemente do Modelo de Erro Convencional (MEC) - apresentado a seguir - o AEM leva em consideração os erros relacionados à redução do modelo.

### 4.4.1 Modelo de Erro Convencional

De maneira sucinta, o modelo de observação ou modelo de erro na abordagem dos problemas inversos considera o modelo físico e a sua solução como suficientemente acuradas. No contexto do problema de estimativa de estado, isto significa que o modelo de evolução-observação definido pelas Eqs. (4.2) e (4.3) representam adequadamente a física do problema. O modelo de evolução-observação fornecido por essas equações é então aqui reescrito, assumindo que as incertezas do modelo de observação são aditivos e independentes. Isto é:

$$\mathbf{x}_n = \mathbf{f}_n(\mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{y}_n) \quad (4.23a)$$

$$\mathbf{z}_n = \mathbf{h}_n(\mathbf{x}_n) + \hat{\mathbf{v}}_n, \quad n = 1, \dots, N \quad (4.23b)$$

Assumindo que os erros de observação  $\hat{\mathbf{v}}_n$  são Gaussianos, com média  $\bar{\hat{\mathbf{v}}}_n$  (geralmente,  $\bar{\hat{\mathbf{v}}}_n = 0$ ) e matriz de covariância conhecida  $\mathbf{W}_n$ , a função de verossimilhança  $\pi(\mathbf{z}_n|\mathbf{x}_n)$  é dada por:

$$\pi(\mathbf{z}_n|\mathbf{x}_n) \propto \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[ \mathbf{z}_n^{med} - \mathbf{h}_n(\mathbf{x}_n) - \hat{\mathbf{v}}_n \right]^T \mathbf{W}_n^{-1} \left[ \mathbf{z}_n^{med} - \mathbf{h}_n(\mathbf{x}_n) - \hat{\mathbf{v}}_n \right] \right\} \quad (4.24)$$

#### 4.4.2 Modelo de Erro de Aproximação

Na proposição de um modelo matemático para a estimativa de um determinado conjunto de incógnitas a partir de um conjunto de observações, o AEM tem por objetivo efetuar correções nestas estimativas através do conhecimento do comportamento estatístico dos erros cometidos por este modelo, em comparação a outro modelo, este sendo mais robusto e mais realístico, melhor descritivo da realidade física do problema em estudo. Neste ponto, pode-se definir o primeiro modelo como sendo o *modelo reduzido*<sup>1</sup>, enquanto ao segundo se dá o nome de *modelo completo*<sup>2</sup>[6, 101, 136].

A ideia central do AEM é bem simples do ponto de vista matemático. Supõe-se que a estimativa das incógnitas  $\mathbf{x}$  a partir das observações  $\mathbf{z}$  é realizada através do modelo completo, Eqs. (4.23a) e (4.23b).

Supondo-se que, por dada razão, o uso deste modelo implicaria em um custo computacional elevado, desejando-se que este seja substituído pelo modelo reduzido

$$\mathbf{x}_n^r = \mathbf{f}_n^r(\mathbf{x}_{n-1}^r, \mathbf{y}_n^r) \quad (4.25a)$$

$$\mathbf{z}_n^r = \mathbf{h}_n^r(\mathbf{x}_n^r) + \hat{\mathbf{v}}_n \quad (4.25b)$$

onde  $\mathbf{x}^r$ ,  $\mathbf{y}^r$  e  $\mathbf{z}^r$  são respectivamente o vetor de estado, o vetor de incertezas, vetor das variáveis observáveis originais em um espaço reduzido  $r$ -dimensional.

Além disso, supõe-se a existência de um operador linear  $\hat{P}_x$ , de modo que  $\mathbf{x}_n^r = \hat{P}_x \mathbf{x}_n$ , com  $\mathbf{x}^r$  um vetor de estado de possivelmente de ordem menor do que a de  $\mathbf{x}$ . Da mesma maneira, assume-se que  $\mathbf{y}_n^r = \hat{P}_y \mathbf{y}_n$ .

Desta forma, podemos escrever [101, 137]

$$\mathbf{x}_n^r = \hat{P}_x \mathbf{f}_n(\mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{y}_n) \quad (4.26a)$$

$$= \mathbf{f}_n^r(\mathbf{x}_{n-1}^r, \mathbf{y}_n^r) + \hat{P}_x \mathbf{f}_n(\mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{y}_n) - \mathbf{f}_n^r(\hat{P}_x \mathbf{x}_{n-1}, \hat{P}_y \mathbf{y}_n) \quad (4.26b)$$

$$= \mathbf{f}_n^r(\mathbf{x}_{n-1}^r, \mathbf{y}_n^r) + \boldsymbol{\varepsilon}_n^r \quad (4.26c)$$

$\boldsymbol{\varepsilon}_n^r$  é chamado de erro de aproximação do modelo de evolução e é definido por

$$\boldsymbol{\varepsilon}_n^r = \hat{P}_x \mathbf{f}_n(\mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{y}_n) - \mathbf{f}_n^r(\hat{P}_x \mathbf{x}_{n-1}, \hat{P}_y \mathbf{y}_n) \quad (4.27)$$

---

<sup>1</sup>Na literatura internacional é definido como *reduced/surrogate model*.

<sup>2</sup>Apresenta-se como *complete model*.

Da mesma forma, para o modelo de observação tem-se

$$\mathbf{z}_n = \mathbf{h}_n(\mathbf{x}_n) + \hat{\mathbf{v}}_n \quad (4.28a)$$

$$= \mathbf{h}_n^r(\mathbf{x}_n^r) + \mathbf{h}_n(\mathbf{x}_n) - \mathbf{h}_n^r(\hat{P}_x \mathbf{x}_n) + \hat{\mathbf{v}}_n \quad (4.28b)$$

$$= \mathbf{h}_n^r(\mathbf{x}_n^r) + \boldsymbol{\vartheta}_n^r + \hat{\mathbf{v}}_n \quad (4.28c)$$

onde  $\boldsymbol{\vartheta}_n^r$  é chamado de erro de aproximação do modelo de observação e é definido por

$$\boldsymbol{\vartheta}_n^r := \mathbf{h}_n(\mathbf{x}_n) - \mathbf{h}_n^r(\hat{P}_x \mathbf{x}_n) \quad (4.29)$$

Os modelos reduzidos de evolução-observação são então dados por:

$$\mathbf{x}_n^r = \mathbf{f}_n^r(\mathbf{x}_{n-1}^r, \mathbf{y}_n^r) + \boldsymbol{\varepsilon}_n^r \quad (4.30a)$$

$$\mathbf{z}_n^r = \mathbf{h}_n^r(\mathbf{x}_n^r) + \boldsymbol{\nu}_n^r \quad (4.30b)$$

onde  $\boldsymbol{\nu}_n^r = \hat{\mathbf{v}}_n + \boldsymbol{\vartheta}_n^r$

Uma vez conhecidas as estatísticas dos erros de aproximação  $\boldsymbol{\varepsilon}_n^r$  e  $\boldsymbol{\nu}_n^r$ , o modelo reduzido de evolução-observação pode ser usado ao lugar do modelo de evolução-observação dado pelas Eqs. (4.2) e (4.3). Observe que  $\boldsymbol{\nu}_n^r$  inclui as incertezas de medições assim como, os erros de modelagem. Note que as estatísticas que descrevem os erros de aproximação  $\boldsymbol{\varepsilon}_n^r$  e  $\boldsymbol{\nu}_n^r$  são condicionadas as medidas, o que requer a solução dos modelos computacionalmente caros durante a solução do problema inverso, podendo ser contornado calculando-se estatísticas aproximadas baseadas na modelagem da informação *a priori* disponível sobre os modelos [137].

Ainda que o conceito do AEM se mostre bastante simples, sua implementação requer alguns cuidados. A inclusão deste erro de aproximação pode requerer mudanças não triviais nos algoritmos de solução de problemas inversos.

No Modelo Melhorado de Erro (MME) o vetor da variáveis de estado  $\mathbf{x}$  e o erro de aproximação  $\boldsymbol{\varepsilon}^r$  são considerados independentes. No caso em que esta dependência não for desprezada, tem-se o Modelo Completo de Erro (MCE) [5, 101].

## Determinação das Estatísticas dos Erros

O grande mérito do AEM encontra-se no fato de que, em uma grande quantidade de casos, os erros de aproximação podem ser calculados antes que qualquer observação seja processada pelo filtro, ou seja, de forma *offline*, desde que a *priori* seja informativa.

Assume-se que os erros  $\boldsymbol{\varepsilon}_n^r$  e  $\boldsymbol{\nu}_n^r$  são modelados como variáveis randômicas Gaussianas.

Sendo  $\boldsymbol{\nu}_n^r$  uma variável randômica Gaussiana e assumindo que os erros de medidas são Gaussianos, com média zero e covariância  $\mathbf{W}_n = \mathbf{I}\sigma^2$  e além disso, desprezando a dependência linear entre os erros do modelo  $\boldsymbol{\nu}_n^r$  e as variáveis de estado contidas no vetor  $\mathbf{x}_n^r$ , a função de verossimilhança  $\pi(\mathbf{z}_n|\mathbf{x}_n^r)$ , tirando a constante de proporcionalidade pode ser escrita como

$$\pi(\mathbf{z}_n|\mathbf{x}_n^r) \propto \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[ \mathbf{z}_n^{med} - \mathbf{h}_n^r(\mathbf{x}_n^r) - \bar{\boldsymbol{\nu}}_n^r \right]^T \mathbf{W}_{\nu_n}^{-1} \left[ \mathbf{z}_n^{med} - \mathbf{h}_n^r(\mathbf{x}_n^r) - \bar{\boldsymbol{\nu}}_n^r \right] \right\} \quad (4.31)$$

onde  $\bar{\boldsymbol{\nu}}^r$  e  $\mathbf{W}_{\nu_n}$  são respectivamente a média e a covariância dos erros, as quais incluem as estatísticas dos erros de aproximação e dos erros de medidas.

Desprezando a dependência linear entre erros de aproximação e as variáveis de estado e os parâmetros, tem-se [101, 138, 139]:

$$\bar{\boldsymbol{\nu}}^r = \mathbb{E}[\boldsymbol{\vartheta}_n] \quad (4.32a)$$

$$\mathbf{W}_{\nu_n} = \mathbf{W}_{\boldsymbol{\vartheta}_n} + \mathbf{W}_n \quad (4.32b)$$

Considerando  $N$  amostras da distribuição *a priori*, os erros de aproximação são quantificados, de modo que as estatísticas possam ser aproximadas, através das seguintes equações:

$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\varepsilon}_n] \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \boldsymbol{\varepsilon}_{n,i} \quad (4.33a)$$

$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\vartheta}_n] \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \boldsymbol{\vartheta}_{n,i} \quad (4.33b)$$

$$\mathbf{W}_{\boldsymbol{\varepsilon}_n} \approx \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N \{ \boldsymbol{\varepsilon}_{n,i} - \mathbb{E}[\boldsymbol{\varepsilon}_n] \} \{ \boldsymbol{\varepsilon}_{n,i} - \mathbb{E}[\boldsymbol{\varepsilon}_n] \}^T \quad (4.33c)$$

$$\mathbf{W}_{\boldsymbol{\vartheta}_n} \approx \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N \{ \boldsymbol{\vartheta}_{n,i} - \mathbb{E}[\boldsymbol{\vartheta}_n] \} \{ \boldsymbol{\vartheta}_{n,i} - \mathbb{E}[\boldsymbol{\vartheta}_n] \}^T \quad (4.33d)$$

Vale ressaltar que a convergência para esse número de amostras dever ser verificada, como por exemplo o cálculo do erro RMS.

## 4.5 Decomposição Ortogonal Própria e Funções de Base Radial

Conforme mencionado no Capítulo 2, A Decomposição Ortogonal Própria (POD) é um método poderoso para aproximações de baixa ordem com boa acurácia quando comparado ao problema original. Este método tem sido amplamente utilizado nas situações em que a criação de um modelo reduzido se faz necessária.



A aplicabilidade desta técnica nos problemas de estimativa de estado é encontrar a correlação entre soluções de problemas diretos correspondentes a um determinado conjunto de valores assumidos dos parâmetros a serem recuperados, produzindo uma aproximação de alta qualidade de baixa ordem da variável de estado em consideração.

Entretanto, para alguns problemas envolvendo a estimativa de variáveis de estado, em particular na utilização dos filtros Bayesianos, uma técnica de interpolação precisa ser utilizada em conjunto com a técnica POD, sendo realizada uma adaptação da técnica POD original com Funções de Base Radial (RBF) .

Nas seções que se seguem, serão abordados os conceitos dessas duas técnicas mencionadas anteriormente, não sendo o objetivo neste estudo aprofundar a matemática que essas teorias exigem, sendo indicados trabalhos que corroborem com o que for mencionado, complementando os tópicos abordados nessa tese.

#### 4.5.1 Conceituando a Decomposição Ortogonal Própria

Suponha que é de interesse criar uma aproximação da função  $S(x)$  em algum domínio de interesse denotado por  $\Omega$ . A função pode ser escrita como uma combinação linear de algumas funções de base  $\psi^i(x)$ .

$$S(x) \approx \sum_{i=1}^I a_i \cdot \psi^i(x) \quad (4.34)$$

Observe que essa aproximação tende a se tornar exata a medida que  $I$  tende ao infinito. Os coeficientes indicados por  $a_i$  representam as amplitudes desconhecidas da expansão. Uma vez que as funções de base são escolhidas, os valores das amplitudes são obtidos por um processo de minimização, onde a aproximação é definida como

$$\left\| S(x) - \sum_{i=1}^I a_i \cdot \psi^i(x) \right\|^{L^2} \rightarrow \min \quad (4.35)$$

onde  $\|\cdot\|^{L^2}$  denota a norma  $L^2$  definida por

$$\|f(x)\|^{L^2} = \int_{\Omega} |f(x)|^2 d\Omega \quad (4.36)$$

e onde  $\Omega$  representa o domínio de aproximação.

Existe uma liberdade considerável na seleção do conjunto de funções de base  $\psi^i(x)$ , obtido em (4.34), sendo este completo e linearmente independente. Além disso, é aconselhável tomar os conjuntos ortonormais de funções básicas seguindo a

seguinte propriedade

$$\int_{\Omega} \psi^i(x) \cdot \psi^j(x) d\Omega = \delta_{ij}^k \quad (4.37)$$

onde  $\delta_{ij}^k(\cdot)$  é o delta de Kronecker, definido como:

$$\delta_{ij}^k = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j, \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (4.38)$$

Neste caso, a determinação das amplitudes torna-se relativamente simples, como

$$a_j = \int_{\Omega} S(x) \psi^j(x) d\Omega \quad (4.39)$$

Para funções de base não ortogonais, a determinação das amplitudes exigiria uma solução de um conjunto de equações lineares.

Além disso, esta base precisa ser otimizada, no sentido que, para cada valor de  $I$ , a aproximação deve ser tão boa quanto possível em termos de erro quadrático mínimo (4.35). Em outras palavras, o objetivo é encontrar uma sequência de funções ortonormais, de modo que as duas primeiras dessas funções ofereçam a melhor aproximação possível [112]. Uma vez encontradas, essas funções ortogonais especialmente ordenadas são chamadas de nós ortogonais apropriados para a função  $S(x)$  e a Eq. (4.35) é chamada de Decomposição Ortogonal Própria de  $S(x)$ .

## 4.5.2 Fundamentos

A noção fundamental de POD é o instantâneo, sendo estes uma coleção de  $M$  valores amostrados do campo de interesse. Cada instantâneo é armazenado em um dado vetor  $\mathbf{s}$ . A coleção de instantâneos  $I$  são gerados pela alteração de alguns dos parâmetros sobre os quais esse campo depende, sendo armazenado na matriz retangular  $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{M \times I}$ . O esboço de uma ideia do instantâneo é apresentado na Fig. 4.3. Os instantâneos podem ser obtidos, seja por simulação numérica ou diretamente calculados de dados experimentais, neste caso sem qualquer conhecimento *a priori* sobre o sistema, sendo utilizados um, ou mais, parâmetros para isso. Do ponto de vista da transferência de calor, os parâmetros utilizados podem ser: Temperatura, Fluxo de Calor, parâmetros para as condições de contorno, geração interna de calor, propriedades do material, dentre outros.

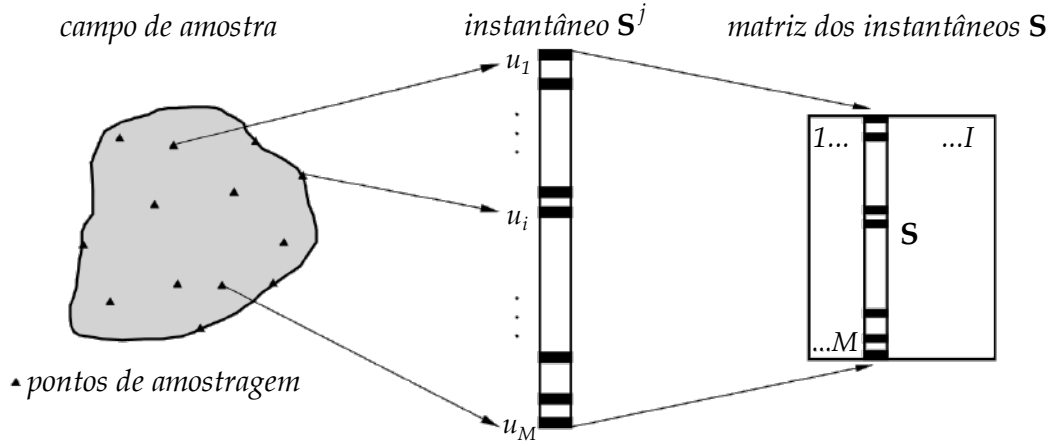


Figura 4.3: Desenho Esquemático do conceito do instantâneo. Adaptado de OSTROWSKI *et al.* [106].

### POD como Análise de Componentes Principais

A teoria do POD geralmente é encontrada na literatura sob o nome de Análise de Componentes Principais (ACP)<sup>3</sup>, embora alguns autores também o chamem de expansão ou decomposição de Karhunen-Loève [140]. O PCA é um método originalmente desenvolvido com base estatística, que trata de variáveis aleatórias, pelo que o próprio método é naturalmente de natureza discreta [105]. A ideia central de PCA é reduzir a dimensionalidade de um conjunto de dados consistindo de um grande número de variáveis correlacionadas, mantendo o máximo possível a variação presente no conjunto de dados. Esta tarefa é realizada transformando os dados em um novo conjunto de variáveis, denominado Componentes Principais (CPs), que não estão correlacionados e que são ordenados para que os primeiros retirem a maior parte da variação presente em todas as variáveis originais. Por outro lado, as últimas CPs identificam direções em que há pouca variação, ou seja, eles identificam uma relação linear quase que constante entre as variáveis originais. Uma vez identificadas as CPs, é possível reduzir a dimensionalidade do espaço original das variáveis, mantendo apenas as primeiras, com ainda boa precisão da aproximação, uma vez que a PCA havia ordenado essas novas variáveis de tal maneira que os primeiros componentes conservam a maioria das variações do conjunto original [112, 140].

Considere um conjunto de vetores  $M$ -dimensional  $\mathbf{s}$ , armazenados como  $I$  colunas da matriz de instantâneos  $\mathbf{S}$ . No primeiro passo, o objetivo é encontrar uma direção

<sup>3</sup>ou ainda, como *Principal Component Analysis* (PCA).

(coordenada) em relação à qual as projeções de todas os instantâneos atingem o máximo. No segundo passo é construída uma direção ortogonal ao já encontrado. Como no primeiro passo, a projeção dos instantâneos no segundo eixo de coordenadas deve atingir o máximo. É claro que a projeção será menor do que em relação à primeira direção. O próximo passo é determinar a terceira direção ortogonal aos dois já encontrados, utilizando a mesma propriedade que foi utilizada para as duas anteriores. Esta estratégia é seguida até que o número das direções ortogonais seja igual à dimensão  $I$  do conjunto de instantâneos original. Após o procedimento ser concluído, todos os instantâneos são expressos em um novo sistema de coordenadas. Este sistema é denominado como base do POD. As projeções dos instantâneos estão correlacionadas (Fig. 4.4(b)), as projeções em algumas primeiras direções estão descrevendo o conjunto com boa precisão. Pode ser visto a partir da Fig. 4.5.2, que em 2D a correlação mais forte ocorre entre vetores paralelos, enquanto os vetores ortogonais estão completamente não correlacionados [105, 140, 141].

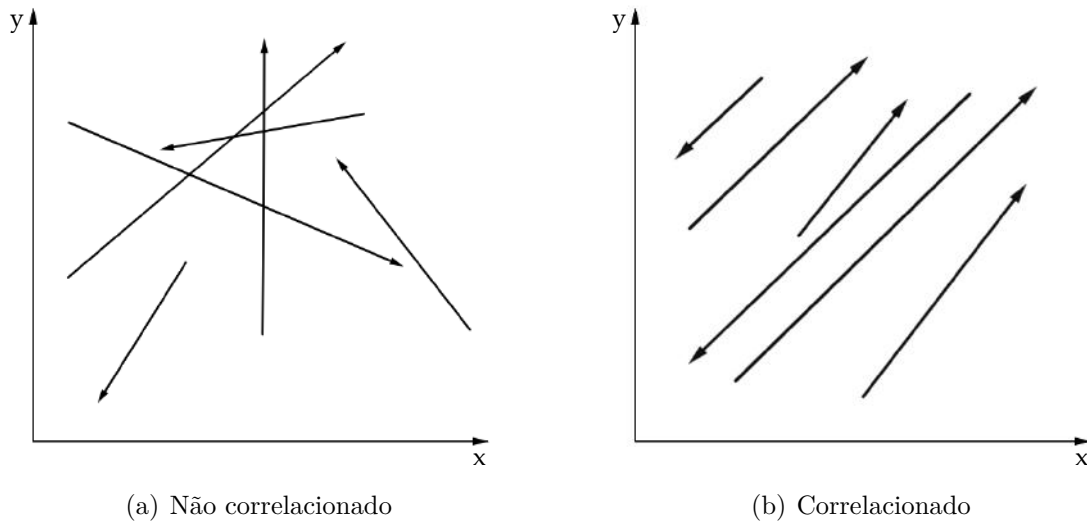


Figura 4.4: Ilustração dos vetores não correlacionado e correlacionado.

De maneira a deixar este ponto mais claro, considere o conjunto de vetores 2D de direções semelhantes (quase colineares), inclinado aproximadamente em  $45^\circ$  para o sistema coordenado original - caso relativamente pouco realista, mas simples permitindo uma visualização geométrica fácil da PCA. No sistema de coordenadas original  $xy$ , o vetor exemplar  $s$  é descrito por duas coordenadas [141]

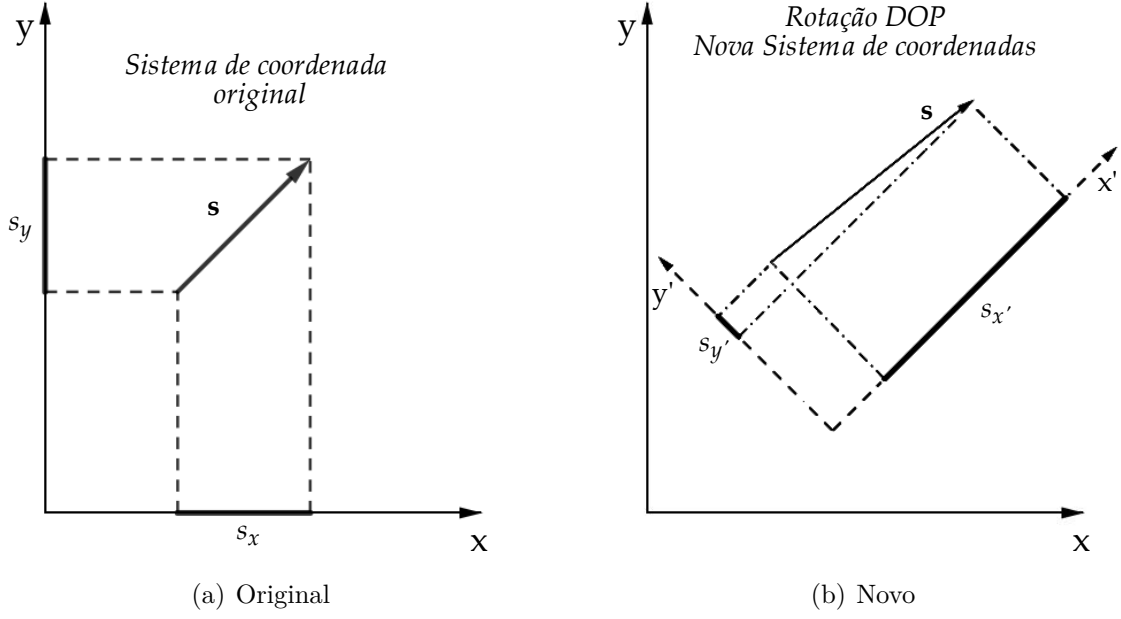


Figura 4.5: Vetores correlacionados e suas projeção no original e no novo sistema de coordenadas 2D.

$$\mathbf{s} = \begin{bmatrix} s_x \\ s_y \end{bmatrix} \quad (4.40)$$

O comprimento desse vetor é dado por

$$|\mathbf{s}| = \sqrt{s_x^2 + s_y^2} \quad (4.41)$$

Como ambas as coordenadas possuem magnitudes comparáveis, negligenciar uma delas irá produzir um grande erro.

Introduzindo um novo sistema de coordenadas  $x'y'$ , rotacionado aproximadamente por  $45^\circ$ , como mostra a Fig. 4.5(b). O vetor  $\mathbf{s}$  segue agora as seguintes coordenadas

$$\mathbf{s} = \begin{bmatrix} s_{x'} \\ s_{y'} \end{bmatrix} \quad (4.42)$$

e, obviamente, exatamente o mesmo comprimento

$$|\mathbf{s}| = \sqrt{s_{x'}^2 + s_{y'}^2} \equiv \sqrt{s_x^2 + s_y^2} \quad (4.43)$$

O novo sistema de coordenadas foi escolhido de tal maneira, que uma coordenada

é a dominante, isto é

$$s_{x'}^2 \gg s_{y'}^2 \quad (4.44)$$

e o vetor  $\mathbf{s}$  pode ser aproximado com uma boa precisão apenas dando o valor de um componente no novo sistema de coordenadas.

$$\bar{\mathbf{s}} = [s_{x'}] \quad (4.45)$$

onde  $\bar{\mathbf{s}}$  denota a única aproximação 1D do vetor original 2D  $\mathbf{s}$  (no novo sistema de coordenadas  $x'y'$ )

Quanto mais correlacionados (colineares) são esses vetores, melhor será a aproximação de coordenadas obtida. Assim, a análise da POD no espaço 2D pode ser interpretada como uma rotação do sistema de coordenadas para ser *o mais paralela possível* ao conjunto de vetores em consideração [141].

### Modelo Exato para a POD

Os instantâneos podem ser tratados como vetores  $M$ -dimensionais. Dado que eles irão gerar um resultado oriundo de um objeto físico concreto, esses dados estão correlacionados (ou inter-relacionados). A matriz de instantâneos pode então ser interpretada como um conjunto de vetores correlacionados.

O objetivo da análise POD é construir um novo sistema de coordenadas (base)  $\psi$  em que os vetores que formam a matriz de instantâneos  $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{M \times I}$  podem ser expressos com uma boa precisão, usando apenas alguns componentes. Observe que, quando todos os componentes das coordenadas do POD são tomadas, a matriz dos instantâneos pode ser reproduzida como

$$\mathbf{S} = \Psi \mathbf{A} \quad (4.46)$$

onde:  $\Psi \in \mathbb{R}^{M \times I}$  é matriz de base consistindo em uma sequência de vetores  $\psi$ ,  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{I \times I}$  é uma matriz de amplitudes que consiste de vetores de coeficientes de expansão  $\{a_1, \dots, a_I\}$  de  $\mathbb{R}^I$ .

Em outras palavras, a Eq. (4.46) define a expansão dos instantâneos em um novo sistema de coordenadas. Os coeficientes desta expansão são reunidos nos vetores  $\mathbf{a}$ .

De maneira a reproduzir a variação espacial do campo em consideração, as amplitudes  $\mathbf{A}$  da expansão (4.46) conhecida precisam ser avaliadas, levando em consideração o fato de que a base do POD é ortonormal

$$\Psi^T \Psi = \mathbf{I} \quad (4.47)$$

onde  $\mathbf{I} \in \mathbb{R}^{I \times I}$  é a matriz identidade, podendo-se avaliar a matriz de amplitudes  $\mathbf{A}$  a partir de

$$\mathbf{A} = \Psi^T \mathbf{S} \quad (4.48)$$

A solução da equação acima fornece as amplitudes para todos os instantâneos gerados. Em alguns casos, as amplitudes de um único instantâneo arbitrário  $\{s_1, \dots, s_M\}$  de  $\mathbb{R}^M$  precisa ser avaliado. Da solução de

$$\mathbf{s} = \Psi \mathbf{a} \quad (4.49)$$

com respeito ao vetor de amplitude desconhecido  $\mathbf{a}$  (uma única coluna da matriz  $\mathbf{A}$ ) é procurado e pode ser encontrado imediatamente aproveitando a ortogonalização da base (4.47). Assim,

$$\mathbf{a} = \Psi^T \mathbf{s} \quad (4.50)$$

Uma vez que todas as amplitudes  $\mathbf{a}$  são conhecidas, pode-se usar a fórmula como sendo o modelo exato completo  $\mathbf{S}$  ou a fórmula (4.49) como modelo de um único (arbitrário) instantâneo.

### 4.5.3 Construção da base POD - Abordagem via Decomposição em Valores Singulares

A Decomposição em Valores Singulares (DVS) pode ser vista como a extensão da decomposição de autovalor para o caso de matrizes não-quadradas. Para fins de maiores esclarecimentos, em [5, 142, 143] pode-se ser encontrado a descrição mais completa da teoria do DVS, onde todas as provas matemáticas são desenvolvidas. O propósito desta seção é apresentar a técnica da DVS e como ela pode ser usada para a construção da base POD.

Em geral, para qualquer matriz  $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{M \times M}$ , existem matrizes ortogonais,  $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{R}^{M \times M}$  e  $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{I \times I}$  tal que

$$\mathbf{\Lambda}^T \mathbf{S} \mathbf{V} = \mathbf{\Sigma} \quad (4.51)$$

onde  $\mathbf{\Sigma} \in \mathbb{R}^{M \times I}$  com todos os elementos iguais a zero, exceto aqueles na diagonal principal, que são iguais a

$$\sigma_i, \sigma_1 > \sigma_2 > \dots > \sigma_{\tilde{r}} > 0, \tilde{r} = \min(I, M) \quad (4.52)$$

$$\sigma_i = \sqrt{\lambda_i} \quad (4.53)$$

$\sigma_i$  são chamados de valores singulares (desvios padrões) da matriz  $\mathbf{S}$ ,  $\lambda_i$  é o autovalor, enquanto as colunas das matrizes  $\mathbf{\Lambda}$  e  $\mathbf{V}$  são chamadas de vetores singulares à esquerda e à direita, respectivamente.

Um número não negativo  $\sigma$  é chamado de um valor singular da matriz  $\mathbf{S}$  se, e somente se, existir  $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{R}^M$  e  $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^I$ , tal que

$$\mathbf{S}\mathbf{v} = \sigma\mathbf{\Lambda} \text{ e } \mathbf{S}^T\mathbf{\Lambda} = \sigma\mathbf{v} \quad (4.54)$$

Uma vez que ambos  $\mathbf{\Lambda}$  e  $\mathbf{V}$  são matrizes ortogonais, fica evidente a partir da Eq. (4.51) que a matriz  $\mathbf{S}$  pode ser expressa como

$$\mathbf{S} = \mathbf{\Lambda}\mathbf{\Sigma}(\mathbf{V})^T \quad (4.55)$$

Suponha que gostaríamos de encontrar matriz com dimensão menor para se aproximar a matriz  $\mathbf{S}$ . Ao manter apenas os primeiros valores  $K$  singulares em uma matriz quadrada  $\mathbf{\Sigma} \in \mathbb{R}^{K \times K}$ , coletando as colunas correspondentes de  $\mathbf{\Lambda}$  e  $\mathbf{V}$ , a  $K$ -ésima aproximação de  $\mathbf{S}$  é dada por

$$\mathbf{S} \approx \mathbf{\Lambda}_K\mathbf{\Sigma}_K(\mathbf{V}_K)^T \quad (4.56)$$

A otimalidade desta aproximação coloca-se no fato de que nenhuma outra matriz de ordem  $K$  pode estar mais próxima de  $\mathbf{S}$  no sentido de mínimos quadrados (raiz quadrada das somas dos quadrados dos elementos). Isto é praticamente o mesmo que buscar o subespaço  $K$ -dimensional para o qual a distância quadrática média dos pontos, do subespaço, é minimizada, o que indica a conexão entre DVS e outros métodos para derivação de base POD [142].

Ao contrário da decomposição ortogonal, o DVS pode ser aplicado em matrizes retangulares. No entanto, há uma forte conexão entre as duas decomposições [140]. Isso pode ser visto multiplicando-se a esquerda a Eq. (4.55) por  $\mathbf{S}^T$ , tendo em mente a ortogonalidade de  $\mathbf{\Lambda}$ , tem-se

$$\mathbf{S}^T\mathbf{S} = \left(\mathbf{\Lambda}\mathbf{\Sigma}(\mathbf{V})^T\right)^T \mathbf{\Lambda}\mathbf{\Sigma}(\mathbf{V})^T = \mathbf{V}(\mathbf{\Lambda}\mathbf{\Sigma})^T \mathbf{\Lambda}\mathbf{\Sigma}(\mathbf{V})^T \quad (4.57)$$

Chamando de  $\mathbf{D} = \mathbf{S}^T\mathbf{S}$ , e mais uma vez levando em consideração a ortogonalidade de  $\mathbf{\Lambda}$ , pode-se escrever

$$\mathbf{D} = \mathbf{V}\mathbf{\Sigma}^T(\mathbf{\Lambda})^T \mathbf{\Lambda}\mathbf{\Sigma}(\mathbf{V})^T = \mathbf{V}\mathbf{\Sigma}^T\mathbf{\Sigma}(\mathbf{V})^T = \mathbf{V}\mathbf{\Sigma}^2(\mathbf{V})^T \quad (4.58)$$

Observe que a matriz  $\mathbf{\Sigma}^2 = \mathbf{\Sigma}^T\mathbf{\Sigma}$  é também uma matriz diagonal  $\mathbb{R}^{M \times I}$ , exceto que seus elementos são os quadrados dos valores singulares, com apenas os elementos na diagonal principal diferentes de zero e iguais a  $\sigma_i^2$



Finalmente, levando em consideração a ortogonalidade da matriz  $\mathbf{V}$ , pode-se reescrever a Eq. (4.58) como

$$\mathbf{D}\mathbf{V} = \mathbf{V}\mathbf{\Sigma}^2 \quad (4.59)$$

A última equação mostra que as colunas de  $\mathbf{V}$  são os autovetores da matriz  $\mathbf{D}$ , à qual pode-se denominar de matriz de correlação modificada, e que os valores singulares da matriz  $\mathbf{S}$  são raízes quadradas dos autovalores da matriz  $\mathbf{D}$ .

Multiplicando a Eq. (4.55) por  $\mathbf{S}^T$  do lado direito e seguindo os mesmos procedimentos apresentados anteriormente, pode-se ainda mostrar que as colunas de  $\mathbf{A}$  são autovetores da matriz de covariância  $\mathbf{C} = \mathbf{S}\mathbf{S}^T$  [142].

Portanto, existe uma total equivalência entre a aproximação dada pela DVS e o derivado anteriormente para a base POD, ou seja,

$$\mathbf{S} \approx \mathbf{\Lambda}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T = \bar{\mathbf{\Psi}}\bar{\mathbf{A}} \quad (4.60)$$

O próximo passo importante da POD é o processo de truncamento. Esse procedimento de truncamento é comumente referido como redução do modelo porque o objetivo principal é reduzir o número total de graus de liberdade dentro do sistema. Para fazê-lo, é preciso observar as variações que ocorrem em cada componente principal. As variâncias diminuirão em um sentido rápido de uma grande variação inicial (primeiro componente principal) para uma variância pequena que permanece relativamente constante através do restante do conjunto de dados. O truncamento das variâncias pode ocorrer quando há pouca alteração na variação, como mostrado na Fig. 4.6. O processo de truncamento pode reduzir significativamente o tamanho do problema, mantendo um grande nível de precisão na estimativa da solução [141]

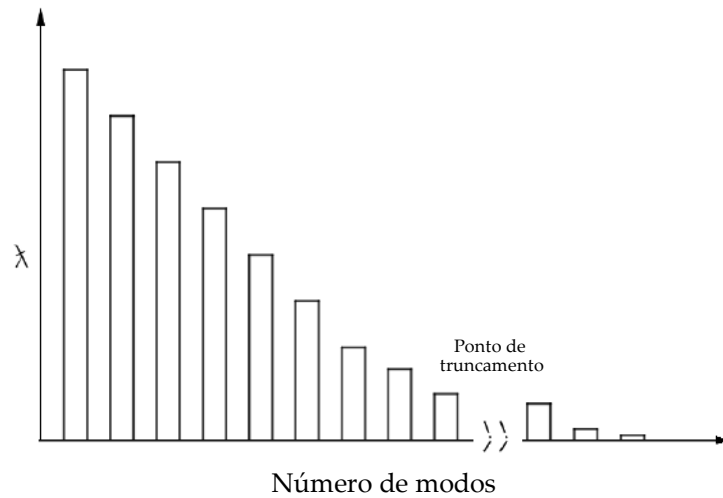


Figura 4.6: Desenho Esquemático do truncamento de  $\lambda$  autovalores para o modelo reduzido.

Alguns autores sugerem que em um ponto específico, ou em determinada equação, o truncamento de dados começa a afetar severamente o erro da estimativa, assim, uma boa regra normalmente adotada é truncar os autovalores uma vez que eles ficam abaixo de um valor mínimo ou começar a permanecer constante em valor [141, 144, 145]. A base POD  $\bar{\Psi}$  resultante, denotado como base POD truncada, consiste em  $K < I$  elementos (vetores)

$$\mathbf{s} \approx \bar{\Psi} \bar{\mathbf{a}} \quad (4.61)$$

## 4.6 Procedimento POD-RBF

O método POD tal como definido anteriormente, não pode ser aplicado a estimativa de variáveis de estado pelo métodos de filtro de partículas pois, como visto na Seção 4.3 os métodos de filtro de partículas necessitam ser computados diversas vezes com partículas de “pesos” randômicos a fim de se gerar uma amostra suficientemente boa para a estimativa da variável de estado de interesse.

De acordo com OSTROWSKI [141], um passo adicional para uma aproximação contínua do sistema em determinado domínio de parâmetro(s) pode ser alcançado se o POD for combinado com o método de superfície de resposta.

Modelos de superfície de resposta são frequentemente utilizados na substituição de modelos físicos complexos, com o intuito de gerar uma correlação entre os dados, reduzindo o custo computacional em problemas de otimização [146]. Isso traz uma generalização necessária para a aproximação de baixa ordem, criando uma função que se aproxima da resposta do sistema. Como mencionado acima, cada instantâneo pode ser expresso como um produto escalar do vetor de amplitudes pela base do POD truncado. A diferença é que a relação entre amplitudes e parâmetros estimados (armazenados no vetor  $\mathbf{k}$ ) pode ser não linear. Cada instantâneo agora pode ser expresso como

$$\mathbf{s}(\mathbf{k}) = \bar{\Psi} \bar{\mathbf{a}} \quad (4.62)$$

Assume-se que todo vetor de amplitude  $\bar{\mathbf{a}}$  é uma combinação linear de funções de interpolação  $p_i$  e portanto, o  $j$ -ésimo elemento do vetor de amplitudes  $\bar{\mathbf{a}}(\mathbf{k})$  assume a forma

$$\bar{a}_j(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^I b_j^i p_i(\mathbf{k}) \quad (4.63)$$

onde  $b_j$  são os coeficientes dessa combinação.

Nesse sentido, as chamadas Funções de Base Radial (RBF) são propostas como

função de interpolação para  $p_i(\mathbf{k})$ . Funções de base radial são assim denominadas porque apresentam simetria radial, ou seja, pertencem a uma classe de funções que decresce ou cresce monotonicamente com o afastamento de um ponto central. São funções reais que dependem somente da distância entre dois pontos e devido à sua boa aproximação e propriedades de suavização, as RBF são frequentemente utilizadas em aproximações multidimensionais, reconhecimento de padrões, etc [146, 147].

Assim, o argumento de cada função  $p_i$ , é de fato, a distância entre o nó  $\mathbf{k}^i$  da RBF e o vetor dos parâmetros  $\mathbf{k}$  a serem estimados.

$$p_i(\mathbf{k}) = p_i(|\mathbf{k} - \mathbf{k}^i|) \quad (4.64)$$

ou ainda,

$$p(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} p_1(\mathbf{k}) \\ \vdots \\ p_i(\mathbf{k}) \\ \vdots \\ p_I(\mathbf{k}) \end{bmatrix} \quad (4.65)$$

onde  $p_i(\mathbf{k})$  é uma função de interpolação definida previamente. Esta hipótese produz uma forma funcional do vetor de amplitude, de tal maneira que a Eq. (4.63) pode ser reescrita como

$$\bar{\mathbf{a}}(\mathbf{k}) = \mathbf{B}\mathbf{p}(\mathbf{k}) \quad (4.66)$$

e  $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{K \times I}$  contém os valores desconhecidos dos coeficientes da combinação linear (Eq. (4.63)).

O conjunto das funções de interpolação  $p_i(\mathbf{k})$  pode ser escolhido arbitrariamente, no entanto algumas escolhas (por exemplo, monomiais) podem levar a sistemas de equações mal condicionadas que precisam ser resolvidas para se obter a matriz de coeficientes  $\mathbf{B}$  [106, 141]

Para que se possa utilizar a aproximação (4.66) eficientemente, a matriz  $\mathbf{B}$  deve ser avaliada. Isso pode ser realizado fazendo com que esta seja exata para todos os instantâneos que foram usados para gerar a base POD, gerando a equação matricial

$$\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{B}\mathbf{P} \quad (4.67)$$

onde  $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{I \times I}$  é a matriz das funções de interpolação definida como:

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} p_1(|\mathbf{k}^1 - \mathbf{k}^1|) & \cdots & p_1(|\mathbf{k}^i - \mathbf{k}^1|) & \cdots & p_1(|\mathbf{k}^I - \mathbf{k}^1|) \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ p_j(|\mathbf{k}^1 - \mathbf{k}^j|) & \cdots & p_j(|\mathbf{k}^i - \mathbf{k}^j|) & \cdots & p_j(|\mathbf{k}^I - \mathbf{k}^j|) \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ p_I(|\mathbf{k}^1 - \mathbf{k}^I|) & \cdots & p_I(|\mathbf{k}^i - \mathbf{k}^I|) & \cdots & p_I(|\mathbf{k}^I - \mathbf{k}^I|) \end{bmatrix} \quad (4.68)$$

com  $\mathbf{k}^j$  e  $\mathbf{k}^i$  vetores de parâmetros utilizados para se gerar o  $j$ -ésimo ou  $i$ -ésimo instantâneo, respectivamente.

Nesta fase, deve-se salientar que a matriz  $\bar{\mathbf{A}}$  é conhecida, pois pode ser avaliada a partir da Eq. (4.60), fazendo-se

$$\bar{\mathbf{A}} \approx \bar{\Psi}^T \mathbf{S} \quad (4.69)$$

Transpondo a Eq. (4.67) tem-se

$$\mathbf{P}^T \mathbf{B}^T = \bar{\mathbf{A}}^T \quad (4.70)$$

que é um conjunto de equações lineares em relação às colunas da matriz  $\mathbf{B}^T$ .

As colunas da matriz  $\bar{\mathbf{A}}^T$  são múltiplos dos vetores laterais do lado direito desta equação. Se apenas a matriz  $\mathbf{P}^T$  é bem comportada, a solução de (4.70) não apresenta dificuldade. A equação acima pode ser resolvida utilizando qualquer método de resolução de sistemas lineares capaz de lidar com múltiplos vetores do lado direito da equação.

COLAÇO e DULIKRAVICH [148] apresentam alguns testes para essa decisão. Neste trabalho, os autores realizam teste para esse tipo de problema e verificam que para um número de equações inferiores a 40, a decomposição LU pode ser utilizada. No entanto, quando o número de variáveis supera essa marca, a matriz  $\mathbf{P}^T$  torna-se mal condicionada e o método DVS (descrito na subseção 4.5.3) deve ser utilizado. Os autores constatarem também que, para mais de 80 variáveis, o solucionador DVS torna-se muito lento e assim, outro método iterativo deve ser utilizado, como por exemplo, o Gerador de mínimos residuais (GMRES) com o pré-condicionador Jacobiano.

A transposição da matriz  $\mathbf{B}$  procurada é definida como

$$\mathbf{B}^T = \mathbf{V} \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{\Lambda}^T \bar{\mathbf{A}}^T \quad (4.71)$$

onde  $\mathbf{V}$  e  $\mathbf{\Lambda}$  são matrizes ortogonais e  $\mathbf{\Sigma}$  é a matriz diagonal com elementos positivos

ou nulos (isto é, os valores singulares), sendo solução DVS da matriz  $\mathbf{P}^T$ .

$$\mathbf{B}^T = \mathbf{\Lambda} \mathbf{\Sigma} \mathbf{V}^T \quad (4.72)$$

Depois de avaliar a matriz de coeficientes  $\mathbf{B}$ , um modelo reduzido do campo em análise pode ser configurado como sendo

$$\mathbf{s}(\mathbf{k}) \approx \bar{\mathbf{\Psi}} \mathbf{B} \mathbf{p}(\mathbf{k}) \quad (4.73)$$

com  $\mathbf{s}(\mathbf{k}) \in \mathbb{R}^M$ ,  $\bar{\mathbf{\Psi}} \in \mathbb{R}^{M \times K}$ ,  $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{K \times I}$  e  $\mathbf{p}(\mathbf{k}) \in \mathbb{R}^I$ .

## 4.7 Crime Inverso

Neste ponto vale ressaltar que existe um preço a se pago pela escolha de se simular as medidas experimentais, uma vez que se deve ter cautela quanto à questão do crime inverso. A rigor, o crime inverso acontece quando o modelo e a realidade estão completamente identificados. Assim, na prática, este fato só seria possível de ocorrer se o modelo matemático representasse uma descrição fiel da realidade, o que não é necessariamente verdade. A consequência do crime inverso é vista nos resultados, que contém estimativas extremamente otimistas que não condizem com uma situação real, onde as medidas utilizadas seriam obtidas através de um experimento. Existem duas práticas que, embora pareçam naturais, configuram um crime inverso, sendo listadas a seguir [5]:

1. A simulação numérica dos dados experimentais é realizada através do mesmo modelo usado para resolver o problema inverso.
2. O tamanho da malha utilizada na simulação numérica dos dados experimentais é o mesmo utilizado na solução do problema inverso.

A segunda forma citada de crime inverso pode ser evitada ao se utilizar malhas mais finas na simulação dos dados experimentais e malhas mais grosseiras na solução do problema inverso. Por outro lado, para que seja possível atender ao primeiro critério, a utilização de modelos matemáticos diferentes para a simulação dos dados experimentais e a solução do problema inverso é recomendada.

Dessa forma, para o problema unidimensional, Seção 3.1, as medidas simuladas serão provenientes da solução analítica, enquanto a solução do problema inverso faz uso da solução numérica pelo Método dos Volumes Finitos. Para o problema bidimensional, as medidas simuladas serão provenientes da solução do modelo completo, Seção 3.2, enquanto a solução do problema inverso faz uso do modelo reduzido 4.5, com o auxílio do modelo de erro 4.4.

# Capítulo 5

## Verificação das Soluções Numéricas

Neste capítulo, encontram-se descritos os processos de verificação dos principais códigos computacionais desenvolvidos para os problemas de mudanças de fase, unidimensional e bidimensional, de modo a garantir que as equações propostas estão sendo solucionadas de maneira correta.

Assim, para o modelo unidimensional, é feita a verificação do modelo direto para um problema de mudança de fase, estudando o fenômeno de solidificação de um material, através da análise de convergência de malha e da comparação do resultados com uma solução analítica conhecida. Esse estudo envolve a solidificação de uma liga binária, à uma determinada concentração [72, 75], sendo investigado sob a perspectiva do método de entalpia explícito e implícito.

No caso do problema bidimensional será feita a verificação da solução usando o código computacional desenvolvido por COLAÇO e DULIKRAVICH [71], aplicado ao problema de armazenamento de energia térmica em uma cavidade quadrada envolvendo uma convecção natural laminar de um fluido Newtoniano incompressível com propriedades térmicas constantes. O problema terá sua solução numérica verificada segundo os critérios estabelecidos pela ASME [13].

As simulações foram desenvolvidas em um sistema computacional Intel(R) Xeon E56445@2,40GHz de dois processadores e 32GB de memória RAM em plataforma Windows®. Foi utilizado neste trabalho a Linguagem Fortran.

### 5.1 Problema Unidimensional

#### 5.1.1 Critérios para Convergência de Malha

O objetivo da análise de convergência de uma malha é verificar se a solução do problema tende assintoticamente para um determinado valor na medida em que a

malha é refinada de forma contínua. Com esta análise é possível determinar o menor tamanho de malha possível no qual sua influência nos resultados se mantenha abaixo de uma determinada tolerância. Desta maneira, este procedimento constitui uma importante etapa para que seja viável à obtenção de uma qualidade nos resultados obtidos e o custo computacional envolvido.

De modo geral, a análise de convergência da malha pode ser realizada de maneira iterativa, podendo ser resumida na Tab. 5.1.

Tabela 5.1: Algoritmo para o Critério de Convergência de Malha.

**Passo 1** - Constrói-se a 1ª malha, soluciona-se o problema e toma-se  $n = 1$ .

**Passo 2** - Toma-se  $n = n + 1$ , constrói-se a  $n$ -ésima malha e obtém-se a solução do problema.

**Passo 3** - Os resultados da  $n$ -ésima malha são projetados na malha  $n - 1$ .

**Passo 4** - Para todos os pontos da malha  $n - 1$ , são calculadas as diferenças relativas simples em relação aos valores projetados da malha  $k$ .

**Passo 5** - A maior variação percentual de temperatura observada em relação aos valores da malha  $n - 1$ , chamada de  $\Delta\Theta_{\max}^n$ , é submetida ao critério de convergência da Eq. (5.1), onde  $\xi$  é a tolerância estipulada. Desta forma, o critério estipulado para a convergência de malha é relativo à última malha gerada.

$$|\Delta\Theta_{\max}^n| \leq \xi \quad (5.1)$$

**Passo 6** - Caso o critério seja satisfeito, atesta-se a convergência de malha de acordo com a tolerância estipulada. Caso contrário, retorne ao passo 2.

Neste estudo, as novas malhas foram obtidas, multiplicando-se o número de volumes da malha original por um fator de 5. Tendo em vista que os problemas aqui apresentados configuram problemas unidimensionais, ressalta-se que é possível estipular critérios de convergência mais exigentes sem tornar o custo computacional excessivamente elevado.

Além da convergência no espaço também é interessante ser analisada a convergência no tempo, sendo assim, não é viável um alto refinamento da malha, sendo que o tempo computacional seja elevado, lembrando que os problemas presentes neste estudo não serão resolvidos apenas uma vez, sendo estes resolvidos para uma variedade de partículas e com um variedades de repetições para uma melhor obtenção do erro RMS. O domínio espacial adotado para a aplicação no modelo que se segue terá o valor adimensional de  $l = 5$ .

### 5.1.2 Solidificação de Liga Binária

O método da entalpia, descrito pelas Eqs. (3.36)- (3.37), foi aplicado de maneira a resolver um problema de solidificação unidimensional, como descrito em CROWLEY e OCKENDON [73]. A solução do método foi verificada com a solução do problema de Stefan, para o caso de uma geometria semi-infinita, resfriada em um dos contornos, conhecido como problema de Rubinstein [75]. A solução analítica para este problema está descrita na Seção 3.1.3.

Uma vez que uma das discretizações na solução pelo MVF para este modelo é feita de forma explícita, é necessário levar em consideração a questão da estabilidade condicional na análise de convergência da malha. O esquema de discretização é apresentado na Seção 3.1.6.

A igualdade entre os sinais dos coeficientes multiplicadores das temperaturas nodais é essencial para a obtenção de soluções fisicamente coerentes. Como convenção, adota-se como regra que todos estes coeficientes devem ser positivos [119]. Assim, para que esta condição seja satisfeita e a estabilidade da solução numérica seja garantida, é necessário que a Eq. (5.2) seja sempre satisfeita. Isto implica na limitação para o passo no tempo imposta pela Eq. (5.3).

$$\frac{2\alpha^f \Delta\tau}{\Delta\chi^2} \geq 0 \quad (5.2)$$

$$\Delta\tau \leq \frac{\Delta\chi^2}{2\alpha^f} \quad (5.3)$$

Buscou-se verificar não só a solução do método explícito de entalpia contra a solução analítica, como também a solução explícita contra a implícita, a fim de analisar qual dos dois esquemas é computacionalmente mais eficiente, uma vez que este, será utilizado na resolução do problema inverso. VOLLER [72] apresenta a discretização através do método explícito, assim, essa referência será utilizada para corroborar os resultados obtidos. Utiliza-se então:

$$f_i = 1, \quad \phi_i^f = \phi_0, \quad \Theta_i = \Theta_0, \quad v_i = \phi_0, \quad \mathcal{H}_i = \Theta_0 + 1. \quad (5.4)$$

De maneira a iniciar a solidificação no volume  $i = 1$ , definiu-se  $f = 0,999$  para o volume de controle. Os cálculos são realizados para o problema de liga binária



definida pelas seguinte propriedades [72]:

$$\begin{aligned} \Theta_{sur} &= -1, & \Theta_0 &= 0, 1, & \phi_0 &= 1 & \alpha &= 1, 5, \\ \mathcal{C}_p &= 2, & \kappa &= 0, 1, & Le &= 4, & \mathcal{D} &= Le, \\ St &= -0, 1. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Como a concentração de soluto na fase sólida tem um valor constante fixado, a escolha da difusividade mássica sólida não tem qualquer influência. Como tal, a configuração foi realizada de modo a assegurar que a estabilidade da equação de transporte de solutos discreta seja satisfeita quando o número de Lewis aumenta.

Respeitado o critério de estabilidade, foi realizada a análise de convergência da malha, iniciando o algoritmo descrito na Seção. 5.1.1 com uma malha de 25 volumes. Os resultados obtidos com o procedimento iterativo de refinamento e comparação são mostrados na Fig. 5.1 onde, com uma malha 500 volumes e um passo de tempo de  $\Delta\tau = 2,5 \times 10^{-5}$ , foi possível obter  $\Delta\Theta_{\max}$  na ordem de  $9 \times 10^{-5}$ .

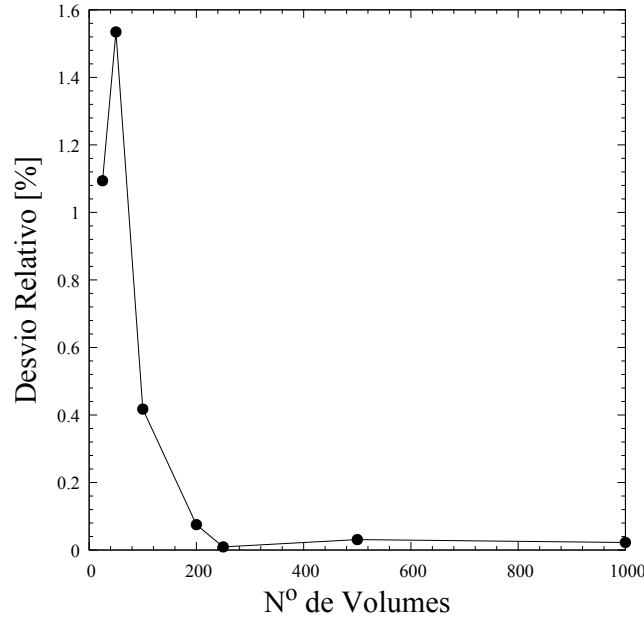


Figura 5.1: Análise de convergência para a malha construída para o modelo direto de Solidificação.

A escolha do tamanho do domínio é suficiente para satisfazer a independência da malha ( $\Delta\chi = 0,01$ ) e a escolha do intervalo de tempo ( $\Delta\tau = 2,5 \times 10^{-5}$ ) é suficiente para evitar problemas inerentes da instabilidade. As figuras que se seguem comparam as previsões da solução analítica de Rubinstein com a solução explícita de entalpia e implícita para o caso onde ocorre resfriamento. Os cálculos são realizados até que a interface sólido-líquido atinja  $\varsigma = 1,74$ , ou que a evolução temporal chegue

em  $\tau = 1, 5$ . A evolução temporal da temperatura no ponto  $\chi = 1, 5$  é apresentada na Fig. 5.2(a) e os respectivos erros dos resultados da solução analítica contra a explícita é apresentado na Fig. 5.2(b). Apesar dos valores não ultrapassarem 0,32%, observa-se que os erros apresentados são substancialmente maiores na vizinhança de mudança de fase do material.

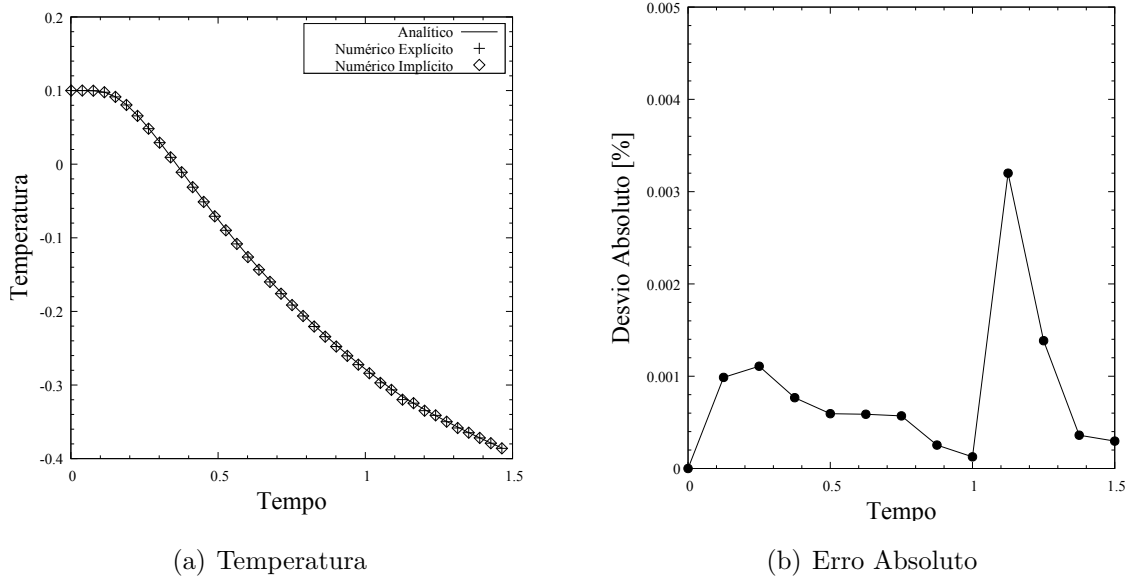


Figura 5.2: Comparação dos perfis de temperatura e do erro absoluto no ponto localizado em  $\chi = 1, 5$  para o processo de solidificação.

Para o esquema implícito, o processo de solução é iterativo até que aconteça um mínimo de 5 iterações para o mesmo ponto e/ou o maior valor residual ( $res_i^{\max} = \mathcal{H}_i^{n+1} - f_i^n - \Theta_i^{n+1}$ ) seja menor que  $10^{-6}$ . O gráfico apresentado na Fig. 5.3 ilustra a evolução da discrepância entre as soluções numéricas explícita e implícita. Foram testados diferentes valores de  $\Delta\tau$  na verificação do esquema. Para valores maiores de  $\Delta\tau$ , o esquema implícito, necessitou realizar mais iterações para atender ao critério de convergência, levando assim, a um maior tempo computacional. Os erros obtidos na verificação das soluções explícita e implícita giram em torno de  $3 \times 10^{-3}\%$ . Apesar do baixo valor para este erro, neste trabalho serão adotadas as soluções com esquema explícito, levando em consideração que o tempo computacional despendido para a solução implícita chega a ser 4 vezes maior que o gasto computacional realizado pela solução explícita. Como neste trabalho a principal contribuição é a aplicação da Classe dos Problemas Inversos, qualquer redução de tempo computacional deve ser levada em consideração, visto que, a solução numérica, que será utilizada como problema direito neste estudo é solucionada muitas vezes.

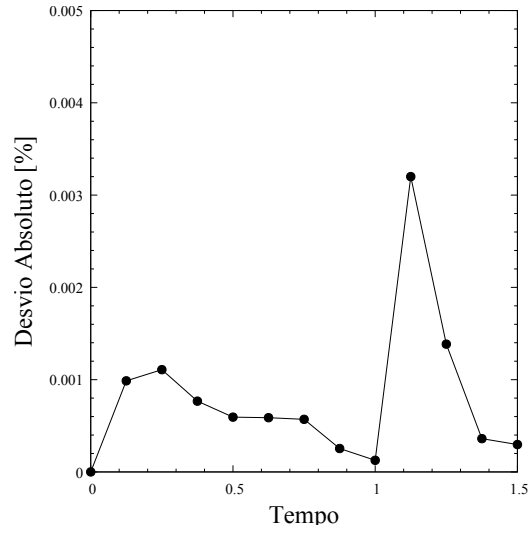


Figura 5.3: Desvio Absoluto oriundo da comparação entre as soluções numérico explícito e numérico implícito para a solidificação.

Pode-se concluir que, após a verificação para uma malha de 500 volumes, consequentemente  $\Delta\chi = 0,01$  e  $\Delta\tau = 2,5 \times 10^{-5}$ , foram os parâmetros que obtiveram uma melhor convergência sem serem afetados pelo custo do tempo de processamento dos resultados, sendo este os candidatos escolhidos para o desenvolvimento dos resultados do modelo unidimensional.

## 5.2 Problema Bidimensional

### 5.2.1 Verificação da Solução

O objetivo da verificação da solução numérica é de estabelecer a precisão numérica, independentemente da precisão do modelo físico. A convergência de malha é uma necessidade em qualquer estudo numérico, sendo essencial verificar se as equações estão sendo resolvidas corretamente e que a solução é insensível à resolução da malha utilizada. A verificação da Solução do Problema Direto é então realizada seguindo o processo de 5 passos descrito pela ASME [13].

A verificação do presente código numérico já foi realizada por COLAÇO e DULIKRAVICH [71], onde os autores verificaram o código através da análise de uma solidificação transiente para uma mistura binária tal como relatado em VOLLER *et al.* [66].

A Solução numérica é então obtida para uma geometria Cartesiana bidimensional, onde um fluxo de irradiância solar é imposto na superfície onde  $x = 0$  enquanto a transferência de calor é desprezada em todas as outras faces. A transferência de massa é desprezada em todas as faces. O fluxo de calor é aplicado de maneira a simular o aquecimento de uma geometria onde se encontra o PCM, desta forma, o fluxo é prescrito para representar uma incidência de luz solar durante o dia, e durante o período noturno, é prescrito como se houvesse uma fonte retirando o calor armazenado durante o dia. O fluxo aplicado é apresentado na Fig. 5.4.

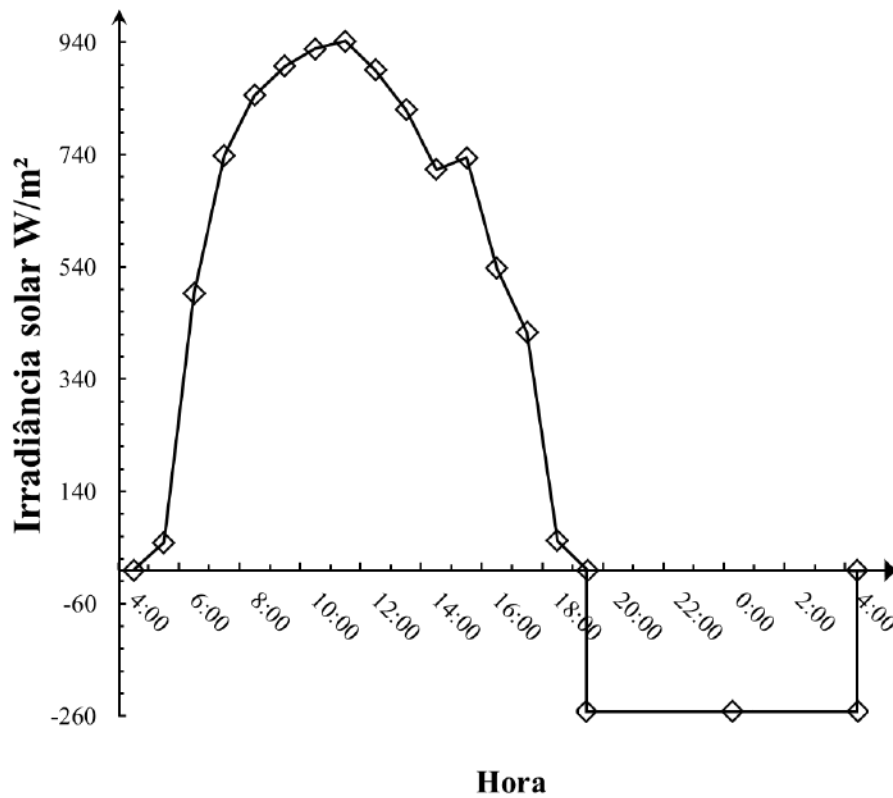


Figura 5.4: Fluxo de Irradiância Solar. Adaptado de MILLER e COLAÇO [149].

A geometria para a análise do problema é então proposta como sendo de uma seção quadrada, com dimensões iguais a  $0,3 \times 0,3\text{m}$ . Para a análise dos resultados se propõe a utilização de 6 pontos localizados nas laterais do domínio onde não há incidência do fluxo de irradiância solar. Um desenho esquemático da geometria do problema com a localização destes pontos é apresentado na Fig. 5.5 e os valores para as localizações destes pontos podem ser verificados na Tab. 5.2. O critério de parada em cada iteração foi tomado como de maneira que a fonte de massa dentro de cada volume de controle deve ser inferior a  $8 \times 10^{-6}$  e o erro no equilíbrio total de energia e soluto deve ser menor que  $1 \times 10^{-2}\%$  e  $1 \times 10^{-4}\%$ , respectivamente.

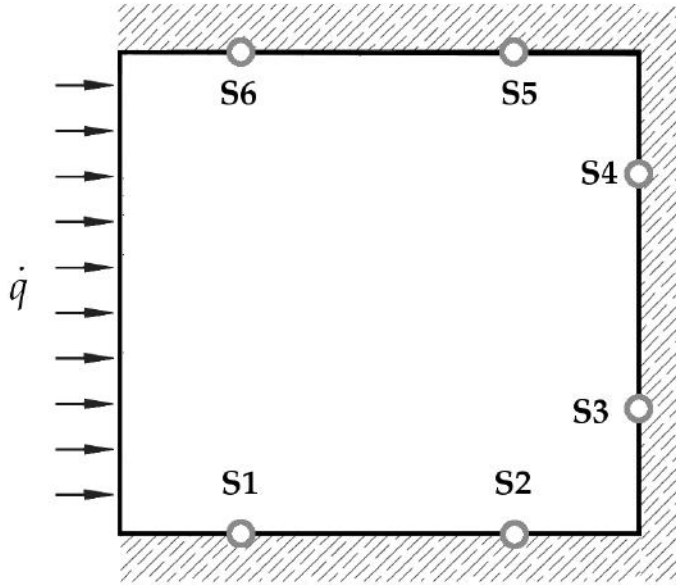


Figura 5.5: Desenho esquemático da geometria utilizada com as localizações dos pontos a serem analisados.

Tabela 5.2: Posições dos pontos em análise.

Ponto	$x \times y$ [m]
1	$0,075 \times 0$
2	$0,225 \times 0$
3	$0,3 \times 0,075$
4	$0,3 \times 0,225$
5	$0,225 \times 0,3$
6	$0,075 \times 0,3$

### Propriedades e Material utilizado

Para as simulações apresentadas, o PCM considerado será a parafina n-octacosane ( $C_{28}H_{58}$ ) e contendo nanopartículas de cobre (Cu). As propriedades termofísicas para a parafina escolhida para este estudo, tanto ela pura, quanto ela aprimorada com quantidades diferentes de nanopartículas de cobre são apresentadas na Tab. 5.3. Os valores foram retirados de LIN e AL-KAYIEM [54], onde os autores determinam as propriedades experimentalmente, utilizando nanopartículas de dimensões de 20nm. O percentual de nanopartícula é calculado tendo como base massa em gramas de nanopartícula para 150ml de parafina.

Tabela 5.3: Propriedades termofísicas da mistura NePCM[54].

Material	C <sub>28</sub> H <sub>58</sub>	C <sub>28</sub> H <sub>58</sub> + 1% Nano-Cu	C <sub>28</sub> H <sub>58</sub> + 2% Nano-Cu
Ponto de Fusão [°C]	60,45	59,57	59,14
Ponto de Solidificação [°C]	58,84	58,52	57,82
Calor Latente [kJ/kg]	166,7	160,3	172,2
Condutividade Térmica [W/m°C]	0,172	0,196	0,226
Massa Específica [kg/m <sup>3</sup> ]	908,6	922,0	932,2

Para as demais propriedades, que não se encontram na tabela, algumas suposições foram consideradas. O calor específico  $c_p$  é considerado como sendo da parafina pura e igual à 2.378 [J/kg·K] [150]. No âmbito dessa Tese será utilizada a fração volumétrica de 1% de nanopartícula (0,011wt%).

Sabendo-se que a parafina tem uma temperatura de fusão variando entre 334K e 331K, considera-se que a temperatura de fusão é dada pela média entre essas duas, ou seja,  $T_m \approx 332\text{K}$ . Considera-se que a Temperatura de referência ( $T_{ref}$ ) seja equivalente a 323,95K e que a temperatura eutética ( $T_{eut}$ ) seja igual a temperatura de 318,5K. Defini-se a concentração de referência ( $C_{ref}$ ) como sendo 0,5wt% e a concentração eutética ( $C_{eut}$ ) equivalente a esta. Dadas estas suposições e com o auxílio da Tab. 5.3, utiliza-se uma função de interpolação de maneira a gerar um diagrama de fases, e assim determinar o coeficiente de segregação  $\kappa$ . O diagrama obtido pela interpolação dos dados é fornecido pelo gráfico da Fig. 5.6.

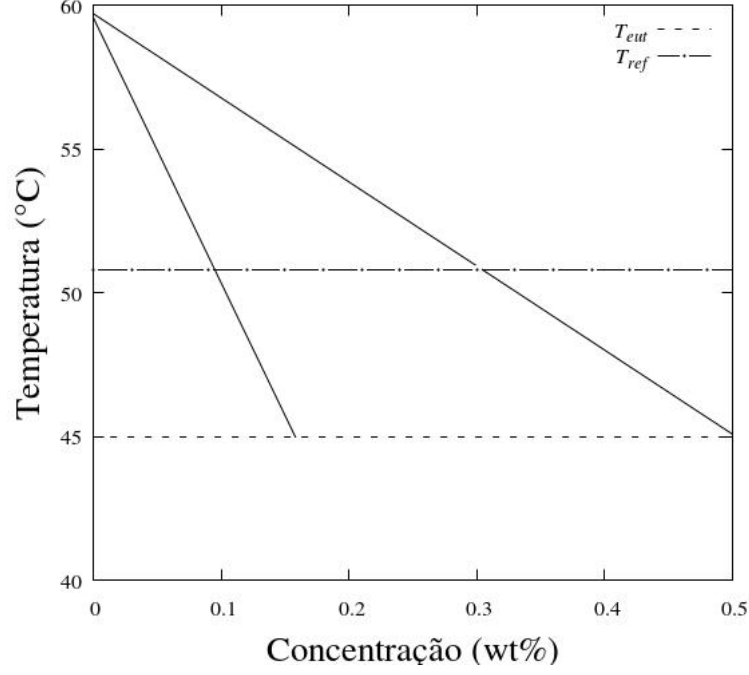


Figura 5.6: Diagrama de fases proposto.

Outras propriedades são necessárias, tais como a viscosidade e difusividade mássica. As seguintes equações fornecem os valores aproximados para a viscosidade e difusividade mássica[29, 34, 151]. Note que a Eq. (5.6) fornece uma viscosidade aproximada do PCM puro e a Eq. (5.7) a viscosidade do NePCM. A viscosidade na fase sólida é considerada como sendo  $1 \times 10^7$  da fase líquida.

Considera-se que a nanopartícula tenha formato esférico, e assim, a Eq. (5.8) fornece a difusividade mássica, onde  $dp$  é o diâmetro da nanopartícula e equivale a  $20 \times 10^{-8}$ m,  $k_B$  é a constante de Boltzmann e equivale a  $1,38 \times 10^{-23}$ m<sup>2</sup>kg/s<sup>2</sup>K. Supõe-se também que os valores para os coeficientes de expansão térmica ( $\beta_T$ ) e expansão de soluto ( $\beta_S$ ) são conhecidos e equivalem a  $4 \times 10^{-5}$ K<sup>-1</sup> e 0,025, respectivamente.

$$\mu_{mb} = 0,001 \exp \left( -4,25 + \frac{1.700}{T_0} \right) \quad (5.6)$$

$$\mu_{mn} = \frac{\mu}{(1 - \gamma)^{2,5}} \quad (5.7)$$

$$D_{mn} = \frac{T_0 k b}{3\pi d_p} \quad (5.8)$$

onde  $T_0$  é a temperatura inicial e  $\gamma$  é a fração volumétrica de nanopartícula.



## Interpolação da Solução

Devido ao refinamento de malha, o número de volumes ao longo do domínio acaba se tornando muito maior do que o número máximo de pontos escolhidos, dificultando assim a seleção dos mesmo valores para os pontos em todas as malhas testadas. Por esta razão, uma rotina de interpolação foi utilizada para se ter um valor de temperatura para cada volume de controle ao longo de  $x$  e  $y$  escolhido para se colocarem os sensores. A rotina de interpolação usada foi a Spline Cúbica.

## Verificação da Solução

A credibilidade dos resultados numéricos é uma questão que necessita sempre ser avaliada, tanto na questão da discretização do modelo matemático, quanto na solução computacional, onde a principal fonte desses erros computacionais é a própria discretização. O procedimento descrito pela ASME tem como base o Índice de Convergência de Malha (ICM). Este procedimento fornece um método assintótico para quantificar incertezas de convergência de malha, relacionando os resultados do teste de convergência de malha aos resultados esperados ao se dobrar a malha usando um método de 2ª ordem. O ICM é baseado na estimativa do erro de convergência derivado da teoria generalizada da Extrapolação de Richardson (ER), podendo esta ser adotada como um estimador de solução formalmente mais precisa e como um estimador de erro [4]. Para quantificar esses erros, geralmente são adotados dois parâmetros diferentes:  $\tilde{e}$ , que é representativo do espaçamento da malha, e  $\tilde{p}$ , que representa a ordem de precisão do esquema numérico. O tratamento de refinamento  $\tilde{e}$  é comumente usado para reduzir os erros de discretização da malha.

Para a aplicação do ICM são estipulados três valores diferentes para a quantidade de volumes na malha, que para critérios de simplificação serão uniformes, tendo a mesma quantidade de volumes para  $x$  e  $y$ . Com a quantidades de volumes definidas, deve-se calcular o espaçamento da malha, definido como  $\tilde{e}$  que é dado pela Eq. (5.9), no caso de problemas bidimensionais.

$$\tilde{e} = \left[ \frac{1}{v} \sum_{i=1}^v (\Delta A^i) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (5.9)$$

onde  $\Delta A^i$  é a área do volume  $i$  ( $\Delta x \cdot \Delta y$ ),  $v$  é o número total de volumes usados para as simulações. Vale ressaltar que para cada valor de  $\tilde{e}$  será necessário definir um passo de tempo ( $\Delta t$ ) para se realizar as simulações.

A quantidade de volumes é escolhida de forma a satisfazer  $\tilde{f}r > 1,3$ , onde  $\tilde{f}r$  é

o fator de refinamento apresentado na Eq. (5.10) [13].

$$\tilde{f}r = \frac{\ddot{e}_{grossa}}{\ddot{e}_{fina}} \quad (5.10)$$

A quantidade de volumes ( $\ddot{e}$ ), os fatores de refinamento  $\tilde{f}r$  e os  $\Delta t$  referentes a cada malha serão apresentados na Tab. 5.4.

As variáveis que serão utilizadas para a verificação da convergência de malha são a Temperatura, avaliada em cada ponto, e a Energia Armazenada, ambas avaliadas ao longo de 24 horas, com intervalos de tempo de 5 minutos (289 pontos no tempo). A Energia Armazenada é calculada pela Eq. (5.11)

$$\Delta E = \rho \Delta V \sum h \quad (5.11)$$

onde  $\rho$  é a massa específica e  $h$  é a entalpia de cada volume.

Tabela 5.4: Parâmetros para a Verificação da Solução.

Malha	$v_3$	18
	$\ddot{e}_3$	$1,67 \times 10^{-1}$
	$\Delta t_3$	$1 \times 10^{-2}$
	$v_2$	24
	$\ddot{e}_2$	$8 \times 10^{-3}$
	$\Delta t_2$	$1,25 \times 10^{-2}$
	$v_1$	32
	$\ddot{e}_1$	$9,375 \times 10^{-3}$
	$\Delta t_1$	$5 \times 10^{-3}$
Fator de	$\tilde{f}r_{21}$	1,33
Refinamento	$\tilde{f}r_{32}$	1,33

O procedimento de 5 passos apresentados em ASME [13] pode ser resumido no Algoritmo presente na Tab. 5.5.

Como resultado da análise de convergência de malha, foram obtidos os valores do ICM mínimos, máximos e médios entre as malhas para cada variável estudada. No caso da Temperatura o ICM foi calculado utilizando a média no tempo do parâmetro  $\check{p}$ , que é a ordem aparente da convergência. Os valores de ICM obtidos, na análise da evolução da Temperatura em cada posição pelo tempo e da Entalpia, estão dispostos nas Tabs. 5.6 e 5.7, respectivamente.

Tabela 5.5: Descrição das etapas para o procedimento da estimativa do erro de discretização [13].

- Passo 1 -** Defina um tamanho de malha representativa,  $\check{e}$ , para o problema de interesse. Para o caso bidimensional esse parâmetro é dado pela Eq. (5.9).
- Passo 2 -** Selecione ao menos 3 valores diferente para  $\check{e}$  e execute simulações para determinar os valores da variável de importância ( $\Xi$ ) para o estudo de simulação. É desejável que o fator de refinamento da malha, Eq (5.10), seja superior a 1, 3. Esse valor de 1, 3 é baseado na experiência e não na derivação formal [13]. O uso de volumes geometricamente semelhantes é preferível.
- Passo 3 -** Sejam  $\check{e}_1 < \check{e}_2 < \check{e}_3$  e  $\tilde{f}r_{21} = \check{e}_2/\check{e}_1$ ,  $\tilde{f}r_{32} = \check{e}_3/\check{e}_2$ . Seja  $\check{e}_1$  a malha mais refinada e  $\check{e}_3$  é a malha menos refinada. Calcule a ordem aparente  $\check{p}$  do método usando a expressão

$$\check{p} = \frac{1}{\ln(\tilde{f}r_{21})} |\ln|\delta_{32}/\delta_{21}|| + \check{q}|$$

$$\check{q} = \ln\left(\frac{\tilde{f}r_{21}^{\check{p}} - \check{s}}{\tilde{f}r_{32}^{\check{p}} - \check{s}}\right)$$

$$\check{s} = 1 \cdot \text{sign}(\delta_{32}/\delta_{21})$$

onde,  $\check{U}_{32} = \Xi_3 - \Xi_2$ ,  $\check{U}_{21} = \Xi_2 - \Xi_1$ , e  $\Xi_j$  representa a solução na  $j$ -ésima malha. Observe que  $\check{q} = 0$  para  $\check{s} = \text{const}$ . A variável  $\check{p}$  pode ser resolvida usando iteração de ponto fixo, com a estimativa inicial igual ao primeiro termo. O valor absoluto de  $\check{p}$  é necessário para garantir a extrapolação em direção a  $\check{e} = 0$  [152]. Os valores negativos de  $\check{U}_{32}/\check{U}_{21} < 0$  são uma indicação de convergência oscilatória. Deve notar-se que, se  $\check{U}_{32} = \Xi_3 - \Xi_2$  ou  $\check{U}_{21} = \Xi_2 - \Xi_1$  estiverem próximos a zero, o procedimento acima não funciona, por conta de erros numéricos, indicando de convergência oscilatória ou, em situações raras, pode indicar que a solução “exata” foi alcançada.

- Passo 4 -** Calcule os valores extrapolados

$$\Xi_{ext,21} = \frac{\tilde{f}r_{21}^{\check{p}}\Xi_1 - \Xi_2}{\tilde{f}r_{21}^{\check{p}} - 1} \text{ e } \Xi_{ext,32} = \frac{\tilde{f}r_{32}^{\check{p}}\Xi_2 - \Xi_3}{\tilde{f}r_{32}^{\check{p}} - 1}.$$

**Passo 5 -** Calcule e relate as seguintes estimativas de erro, em conjunto a ordem aparente  $\check{p}$ .

**Erro relativo aproximado:**  $\tilde{\epsilon}_{a,21} = |\Xi_1 - \Xi_2/\Xi_1|$ .

**Erro relativo relativo extrapolado:**  $\tilde{\epsilon}_{ext,21} = |\Xi_1 - \Xi_2/\Xi_1|$ .

**Índice de Convergência de Malha:**  $ICM_{21} = \frac{1,25\tilde{\epsilon}_{a,21}}{\tilde{f}r_{21}^{\check{p}} - 1}$ .

Da mesma maneira é possível calcular a relação da malha 3 pra 2.

Tabela 5.6: Valores de ICM mínimos, máximos e médio entre as malhas para a temperatura.

		Mínimo	Máximo	Médio
Ponto 1	ICM <sub>21</sub>	$3,30 \times 10^{-8}$	$2,49 \times 10^{-2}$	$8,1 \times 10^{-3}$
	ICM <sub>32</sub>	$3,58 \times 10^{-8}$	$1,92 \times 10^{-2}$	$7,56 \times 10^{-3}$
Ponto 2	ICM <sub>21</sub>	$7,87 \times 10^{-12}$	$9,56 \times 10^{-4}$	$1,79 \times 10^{-4}$
	ICM <sub>32</sub>	$4,11 \times 10^{-12}$	$7,05 \times 10^{-4}$	$1,24 \times 10^{-4}$
Ponto 3	ICM <sub>21</sub>	$2,5 \times 10^{-12}$	$4,53 \times 10^{-4}$	$6,46 \times 10^{-5}$
	ICM <sub>32</sub>	$1,08 \times 10^{-13}$	$2,86 \times 10^{-4}$	$3,53 \times 10^{-5}$
Ponto 4	ICM <sub>21</sub>	$6,26 \times 10^{-14}$	$1,14 \times 10^{-4}$	$1,92 \times 10^{-5}$
	ICM <sub>32</sub>	$2,02 \times 10^{-13}$	$3,18 \times 10^{-4}$	$5,32 \times 10^{-5}$
Ponto 5	ICM <sub>21</sub>	$8,82 \times 10^{-13}$	$3,76 \times 10^{-3}$	$8,34 \times 10^{-4}$
	ICM <sub>32</sub>	$3,76 \times 10^{-12}$	$3,62 \times 10^{-3}$	$7 \times 10^{-4}$
Ponto 6	ICM <sub>21</sub>	$1,29 \times 10^{-8}$	$6,12 \times 10^{-2}$	$1,77 \times 10^{-2}$
	ICM <sub>32</sub>	$1,39 \times 10^{-8}$	$5,87 \times 10^{-2}$	$1,30 \times 10^{-2}$

Tabela 5.7: Valores de ICM mínimos, máximos e médio entre as malhas para a energia armazenada.

	Mínimo	Máximo	Médio
ICM <sub>21</sub>	$3,62 \times 10^{-12}$	$1,93 \times 10^{-2}$	$4,33 \times 10^{-4}$
ICM <sub>32</sub>	$1,61 \times 10^{-13}$	$1,90 \times 10^{-2}$	$9,32 \times 10^{-4}$

A partir dos valores de ICM listados nas tabelas acima, pode-se observar que os mais baixos valores entre as malhas para a temperatura está situado entre as malhas 2 e 1. Observe que os maiores valores encontram-se nas posições mais próximas da face aquecida. Essas variações podem ser justificadas pelo efeito que a convecção

natural tem no meio em análise. Entretanto, observe que para a variável Energia, a presença de ruídos entre as malhas é quase inexistente. Contudo, deve-se observar que os valores obtidos para o ICM estão muito próximos, para se afirmar uma diferença significativa somente se considerando os valores absolutos. Dado a dificuldade relativa ao custo computacional desprendido para a resolução deste problema, considera-se que a malha de  $24 \times 24$  volumes é a melhor representação e esta será utilizada para as demais simulações desta tese.

Nas Figs. 5.7 a 5.12 são apresentados os resultados para as simulações da Temperatura no pontos de 1 a 5, respectivamente. A Fig. 5.13 apresenta o resultado para a Energia Armazenada. A curva  $\Xi_{ext,21}$  representa a extrapolação dos valores entre as malhas fina ( $\Xi_1$ ) e média ( $\Xi_2$ ), vide Tab. 5.4. Esse valor pode ser obtido com o auxílio do Algoritmo 5.5.

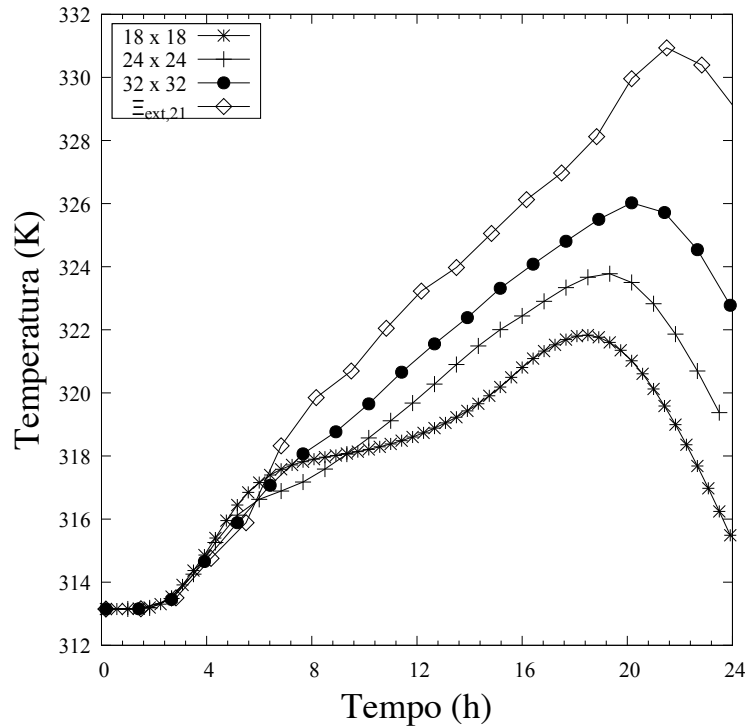


Figura 5.7: Verificação da solução numérica de temperatura, com  $18 \times 18$ ,  $24 \times 24$  e  $32 \times 32$  volumes, na posição  $x = 0,075\text{m}$  e  $y = 0\text{m}$ .

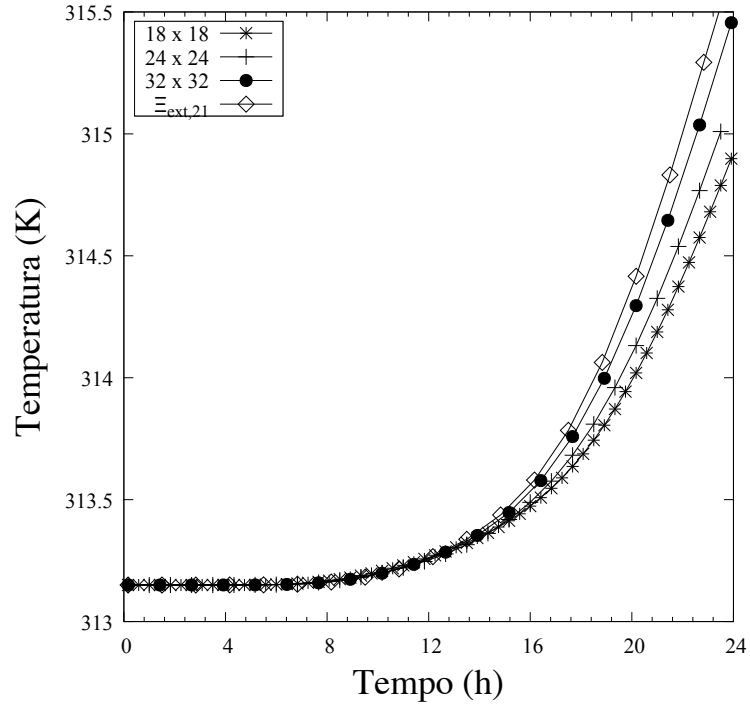


Figura 5.8: Verificação da solução numérica de temperatura, com  $18 \times 18$ ,  $24 \times 24$  e  $32 \times 32$  volumes, na posição  $x = 0,225\text{m}$  e  $y = 0\text{m}$ .

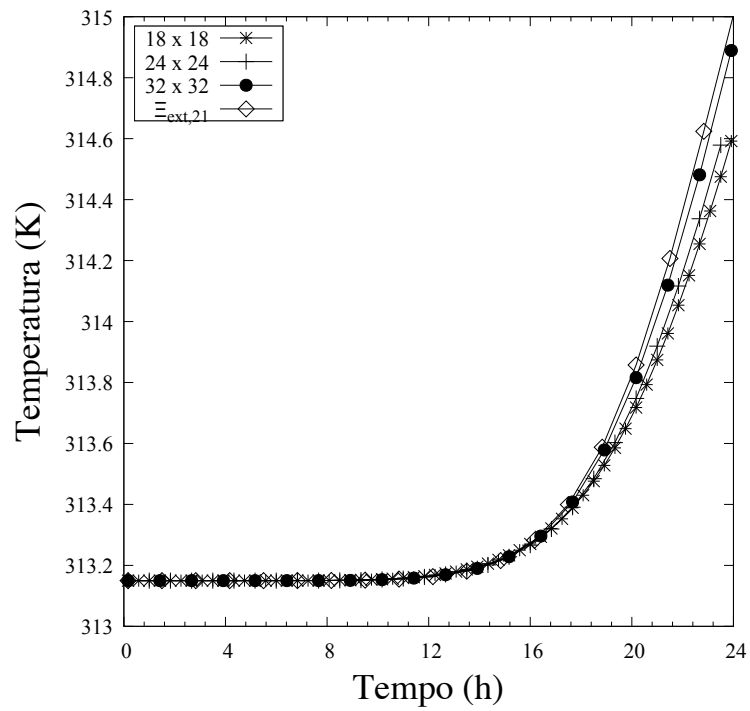


Figura 5.9: Verificação da solução numérica de temperatura, com  $18 \times 18$ ,  $24 \times 24$  e  $32 \times 32$  volumes, na posição  $x = 0,3\text{m}$  e  $y = 0,075\text{m}$ .

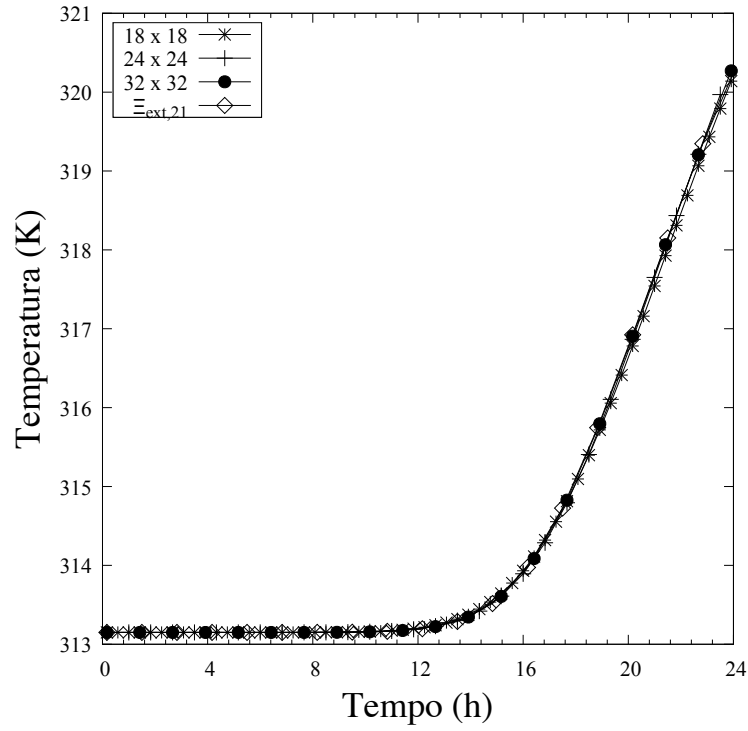


Figura 5.10: Verificação da solução numérica de temperatura, com  $18 \times 18$ ,  $24 \times 24$  e  $32 \times 32$  volumes, na posição  $x = 0,3\text{m}$  e  $y = 0,225\text{m}$ .

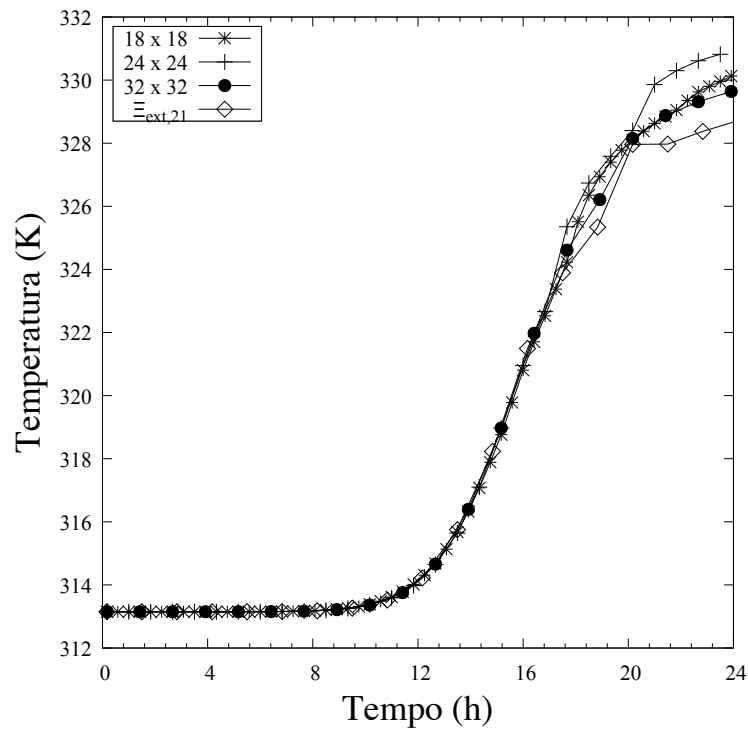


Figura 5.11: Verificação da solução numérica de temperatura, com  $18 \times 18$ ,  $24 \times 24$  e  $32 \times 32$  volumes, na posição  $x = 0,225\text{m}$  e  $y = 0,3\text{m}$ .

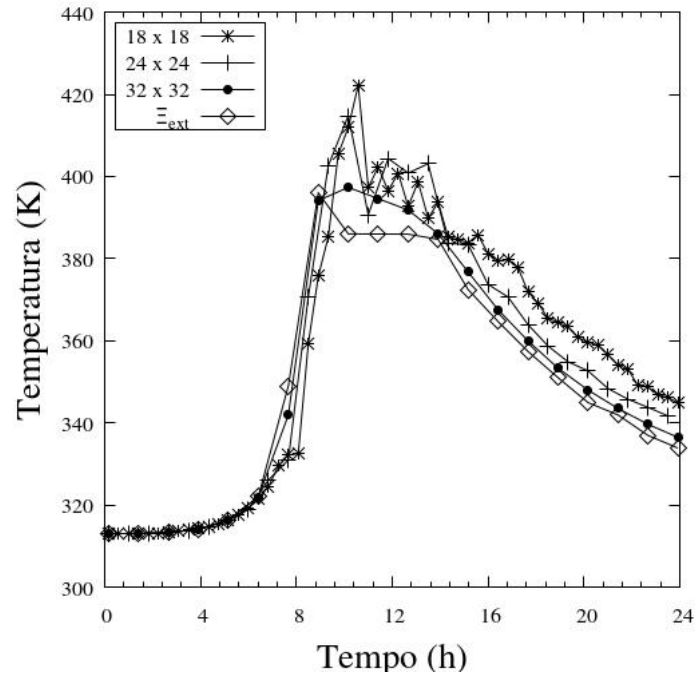


Figura 5.12: Verificação da solução numérica de temperatura, com  $18 \times 18$ ,  $24 \times 24$  e  $32 \times 32$  volumes, na posição  $x = 0,075\text{m}$  e  $y = 0,3\text{m}$ .

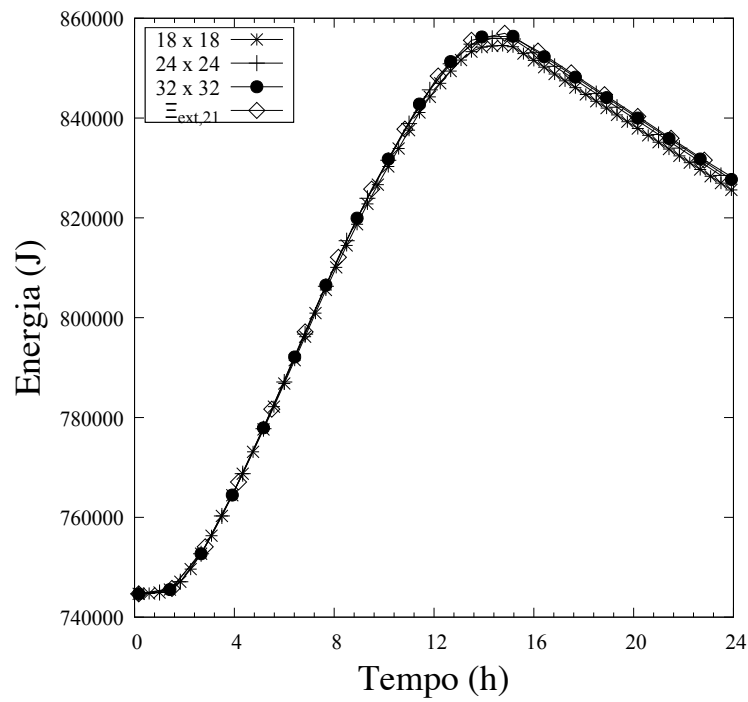


Figura 5.13: Verificação da solução numérica da energia armazenada, com  $18 \times 18$ ,  $24 \times 24$  e  $32 \times 32$  volumes.



### 5.2.2 Concentração de nanopartículas

Considerando o tamanho mínimo da malha obtido seguindo o relatado pela ASME [13], mencionado anteriormente, o problema direto será resolvido utilizando uma malha uniforme de  $24 \times 24$  onde serão observadas as concentrações de nanopartícula na geometria Cartesiana, com um fluxo de irradiância solar incidindo na lateral esquerda do domínio. Neste domínio, considera-se que as nanopartículas estão uniformemente distribuídas no sólido. Nas Figs. 5.14 a 5.17 observa-se os campos de concentração ao longo das 24 horas de simulação, destacando alguns tempos específicos. Em conjunto com os gráficos de concentração são exibidos também os campos de mudança de fase, de forma a possibilitarem um que fase se encontra o momento analisado.

A Fig. 5.14 apresenta a concentração obtida após iniciada 5 horas de simulação, onde pode-se observar que o meio já tem iniciado o processo de liquefação - parte azul da Fig. 5.14(b). Nota-se pelos círculos presentes na Fig. 5.14(a) que as concentrações de nanopartículas começam a se rejeitar em favor da fase líquida, onde suas maiores concentrações estão presentes ao redor da zona de mudança de fase. Após decorridas 7 horas do início do processo de armazenamento de energia (11 horas de tempo físico), horário em que se tem o maior incidência do fluxo de calor, observa-se pelo destaque na Fig. 5.15(a) um aumento da concentração de nanopartículas na fase líquida, indicando que as partículas estão sendo rejeitadas do sólido para o líquido. Decorridas 16 horas do início da simulação, observa-se que o processo de liquefação tem-se fim, dando lugar ao processo de solidificação (ver Fig. 5.16(b)), indicando que a partir deste momento a energia armazenada passa a ser consumida. Constata-se que as maiores concentrações de nanopartículas estão presentes na fase líquida e na zona de mistura, Fig. 5.16(a). As Figs. 5.17(a) e 5.17(b) indicam o final das 24 horas de simulação. Pode-se observar que não houve uma movimentação das nanopartículas na zona de líquido, apenas uma nova rejeição das partículas que permaneciam na zona de sólido em detrimento da fase líquida. Através das Figs. 5.16(b) e 5.17(b) pode-se constatar que o fluxo que incidiu sobre esse domínio não foi capaz de liquefazer completamente o NePCM sólido inicial. Pode-se observar ainda que o fluxo que foi prescrito para a retirada dessa energia desse domínio também não suficiente para retirar toda a energia armazenado no meio.

No Apêndice A as linhas de corrente para cada tempo apresentado a seguir podem ser vistas contra o perfil de mudança de fase e observadas contra a faixa de mudança de fase, mais especificamente quando a fração de sólido ( $f_s$ ) é igual a 0,5. Pode-se observar um campo de fluxo forte no sentido anti-horário mesmo na presença da interferências apresentadas nesse fluxo. Observe que a recirculação desse fluxo ainda é forte nos instantes finais de 24 horas de simulação indicando uma

concentração de energia naquela região.

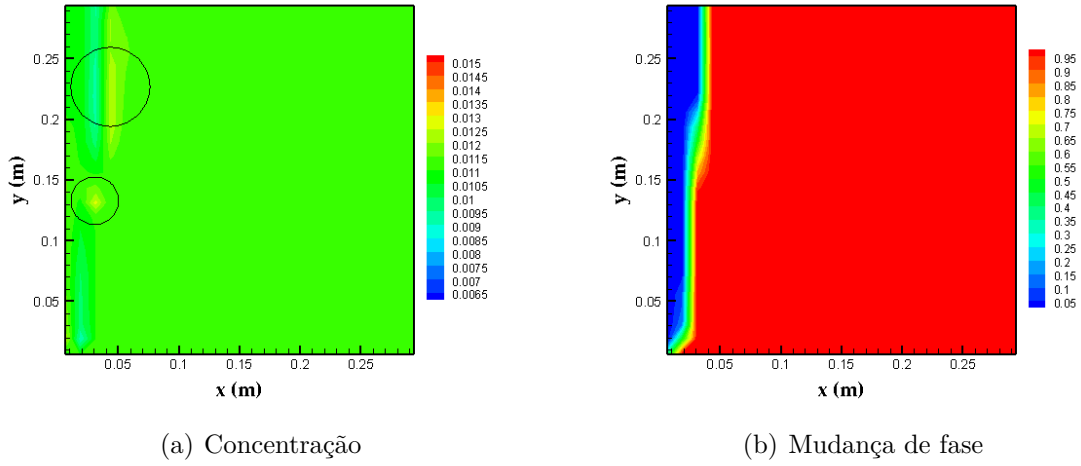


Figura 5.14: Distribuição de concentração e mudança de fase do Problema Direto no tempo  $t = 5h$ .

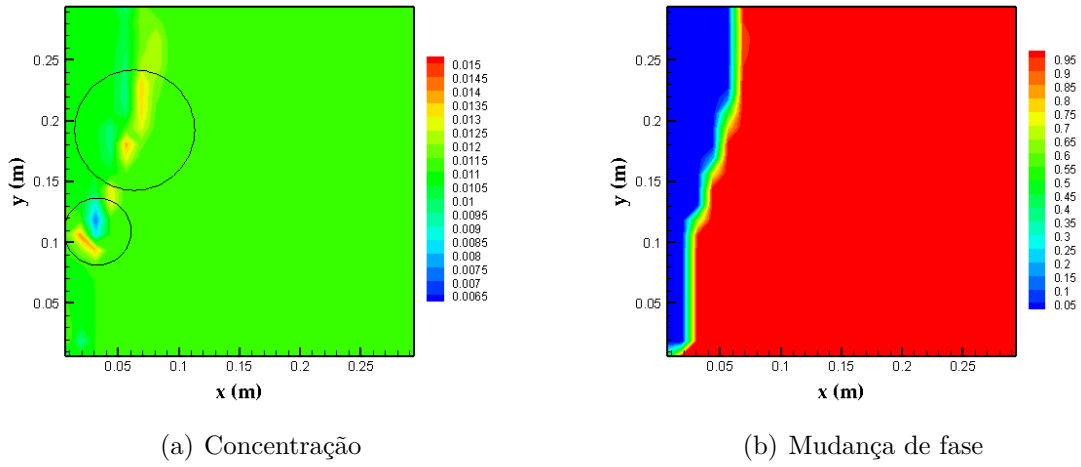
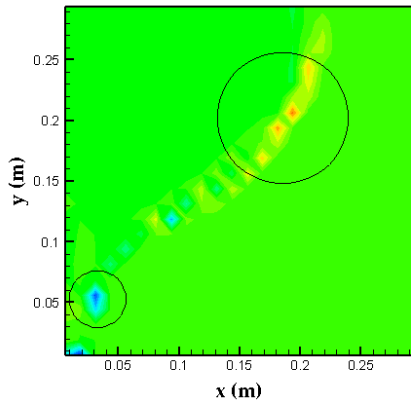
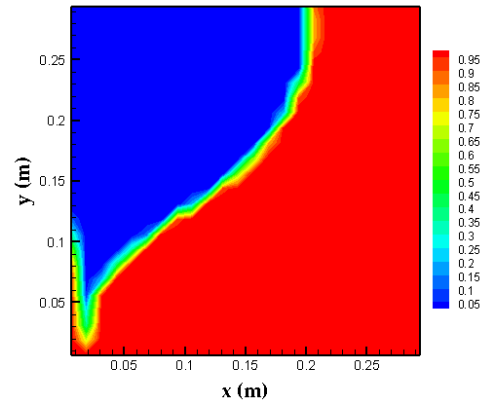


Figura 5.15: Distribuição de concentração e mudança de fase do Problema Direto no tempo  $t = 7h$ .

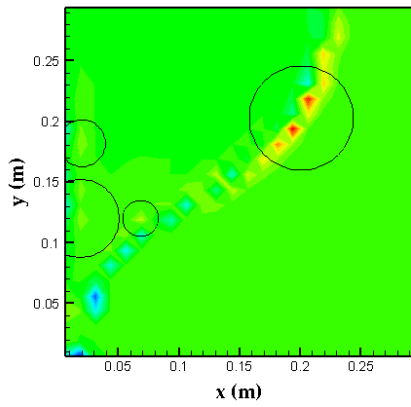


(a) Concentração

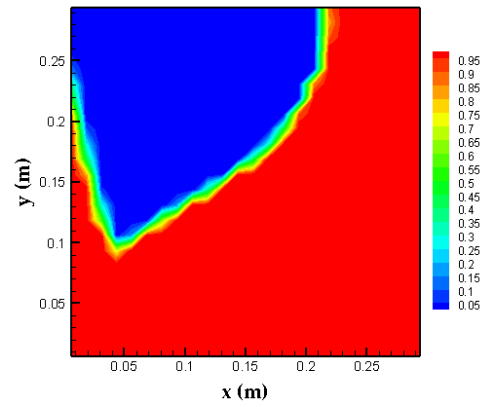


(b) Mudança de fase

Figura 5.16: Distribuição de concentração e mudança de fase do Problema Direto no tempo  $t = 16h$ .



(a) Concentração



(b) Mudança de fase

Figura 5.17: Distribuição de concentração e mudança de fase do Problema Direto no tempo  $t = 24h$ .

## 5.3 Modelo Reduzido

Diferentemente do modelo completo, descrito na seção anterior (Seção 5.2.1), o modelo reduzido será resolvido utilizando o procedimento POD-RBF para o problema bidimensional, descrito anteriormente na Seção 4.5. Este procedimento também será utilizado para computar o erro de modelo pela técnica de erro de aproximação, Seção 4.4.

### 5.3.1 Solução Aproximada pelo procedimento POD-RBF

Este procedimento será utilizado para aproximar a distribuição de temperatura em uma cavidade quadrada, com um fluxo de calor prescrito em uma das laterais, tal como descrito na Seção 5.2.1.

Os instantâneos, necessários para este procedimento, foram gerados ao resolver uma sequência de problemas modelados pelas equação de Conservação de Energia e Massa descritos na Seção 3.2. Para a geração desses instantâneos foram tomadas 100 distribuições Gaussianas com 10% de ruído para o fluxo apresentado na Fig. 5.4. Cada instantâneo consiste em 1.734 valores de temperatura, onde é analisada a temperatura em 6 posições (ver Fig. 5.5) distintas com intervalos de tempo de 5 minutos ao longo de 24 horas (289 pontos). Todas as demais propriedades necessárias para a solução do problema são as mesmas utilizadas na Seção 5.2.1.

A base POD é gerada de forma a utilizar somente 50% de vetores ou a diferença entre os autovalores ser menor que  $1 \times 10^{-4}$ . Essa suposição faz com que a base POD truncada consista em 50 vetores (modos), já que a menor diferença encontrada é de  $2 \times 10^{-2}$ . Observando a Fig. 5.18 vê-se que a magnitude dos autovalores da base POD diminui rapidamente, o que indica uma forte correlação entre instantâneos. Para a solução da base POD será utilizado o método DVS calculado pela rotina DGESDD da biblioteca LAPACK [153].

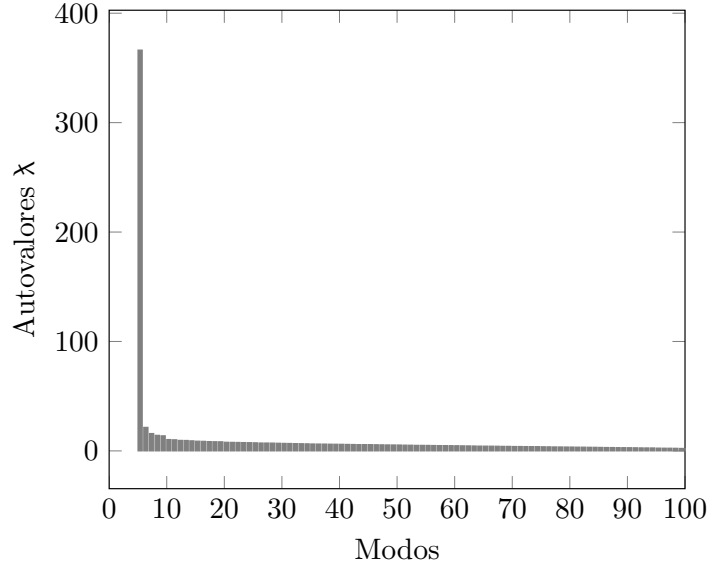


Figura 5.18: Truncamento dos Autovalores da estimativa por POD-RBF.

A função de base radial utilizada na construção das matrizes de parâmetros foi a Multiquadrada Inversa, dada por [147]

$$p_i(\mathbf{k}) = p_i(|\mathbf{k} - \mathbf{k}^i|) = \frac{1}{\sqrt{|\mathbf{k} - \mathbf{k}^i|^2 + c^2}} \quad (5.12)$$

onde  $c$  é o fator de forma. Como a escolha deste parâmetro influencia diretamente na precisão da aproximação, a busca por um valor ótimo foi realizada de maneira a ser o menor valor possível para que a matriz de funções de interpolação (Eq. (4.68)) não seja mal-condicionada. Na Eq. (5.12), o vetor  $\mathbf{k}^i$ , conhecido também como o  $i$ -ésimo nó da RBF, corresponde ao mesmo parâmetro  $\mathbf{k}$  utilizado para gerar os instantâneos. No caso em questão, o vetor  $\mathbf{k}$  consiste no fluxo de irradiância solar  $\dot{q}$ .

As Figs. 5.19 a 5.24 respectivamente apresentam os gráficos para as 6 posições analisadas referente a temperatura com os valores do fluxo real contra as obtidas pelo fluxo com ruído Gaussiano. Pode-se observar que a técnica foi capaz de recuperar os valores de temperatura simulados sem a presença de ruídos. Note que mesmo na presença de incertezas no fluxo, o método foi capaz de produzir resultados estáveis. A estabilidade do algoritmo proposto decorre da característica particular da POD: capacidade de reproduzir características importantes da solução usando o mínimo de graus de liberdade, filtrando o erros de alta frequência [113, 141].

Observando a Fig. 5.24 vê-se que o método foi capaz de suavizar as respostas obtidas decorrentes ao ruído que esta posição sofre devido a convecção natural. Note que as posições 1 e 6 são as que mais sofrem com este efeito. No gráfico 5.23 observe

que o método atenuou as resposta de temperatura nos instantes finais de simulação.

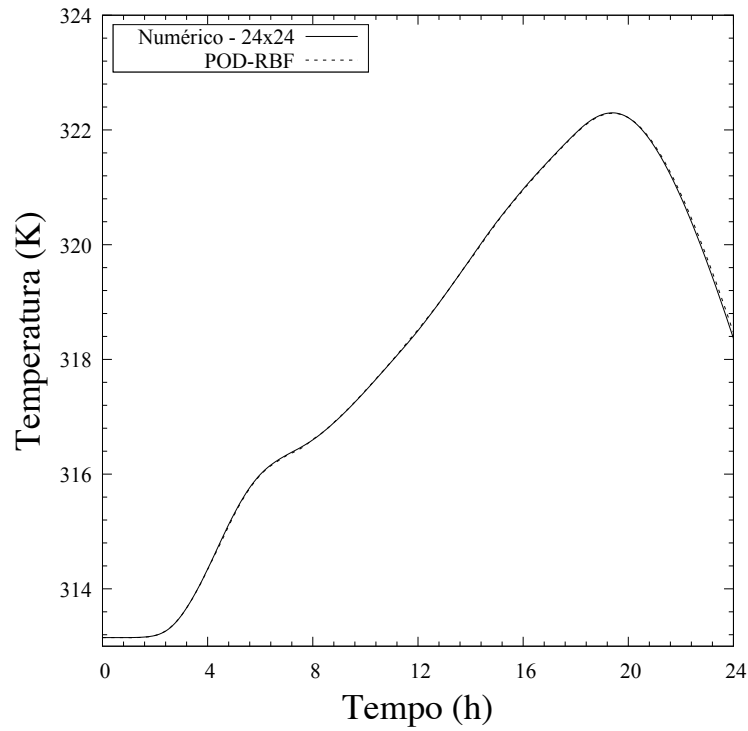


Figura 5.19: Comparação da solução com fluxo exato contra a estimativa de POD-RBF da distribuição de temperatura em  $x = 0,075\text{m}$  e  $y = 0\text{m}$ .

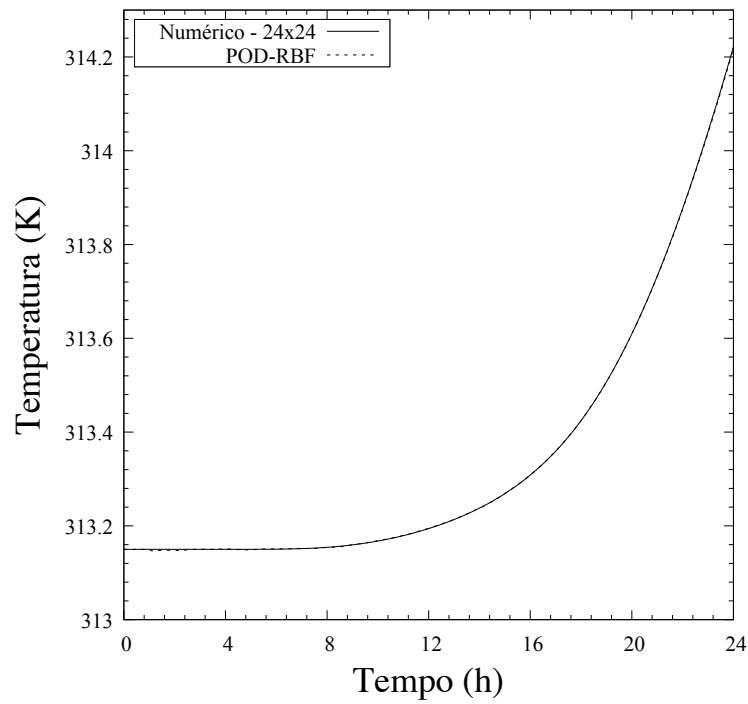


Figura 5.20: Comparação da solução com fluxo exato contra a estimativa de POD-RBF da distribuição de temperatura em  $x = 0,225\text{m}$  e  $y = 0\text{m}$ .

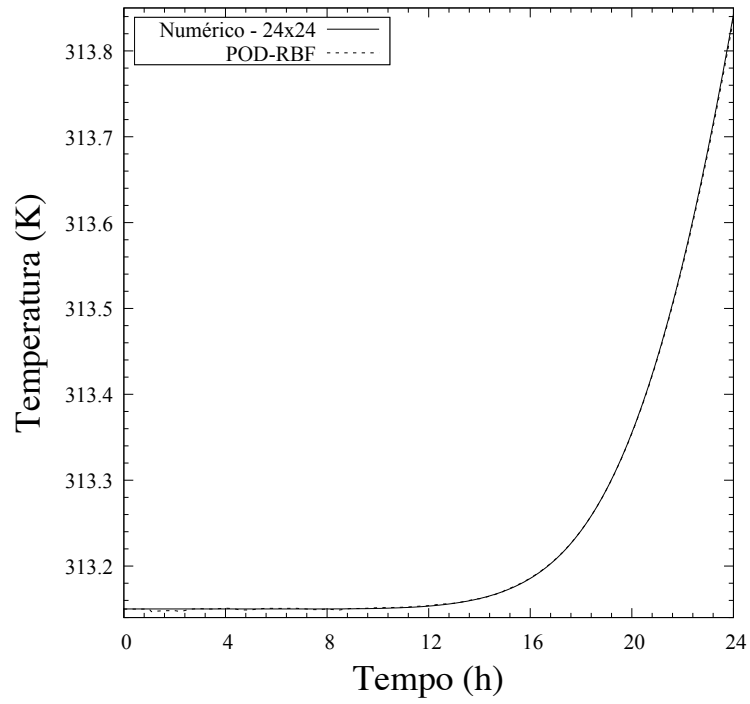


Figura 5.21: Comparação da solução com fluxo exato contra a estimativa de POD-RBF da distribuição de temperatura em  $x = 0,3\text{m}$  e  $y = 0,075\text{m}$ .

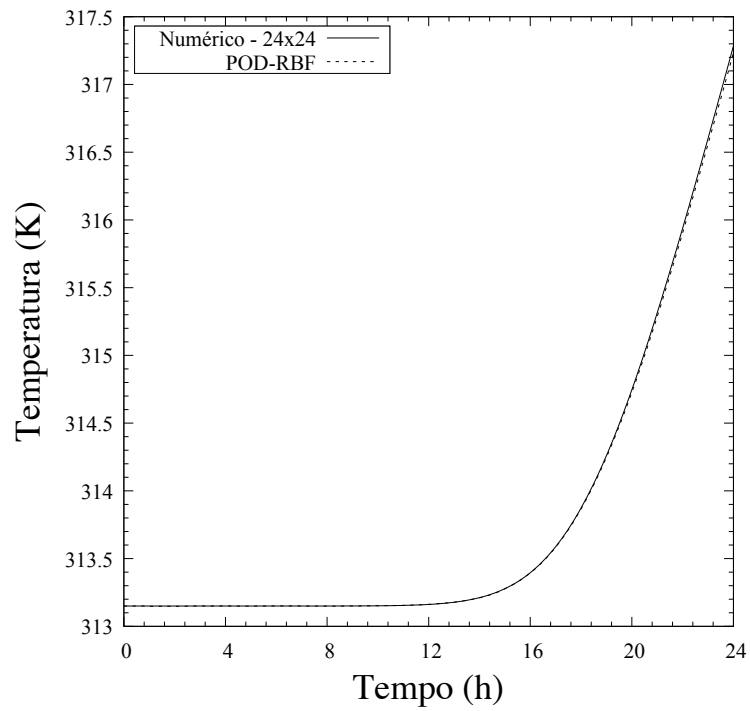


Figura 5.22: Comparação da solução com fluxo exato contra a estimativa de POD-RBF da distribuição de temperatura em  $x = 0,3\text{m}$  e  $y = 0,225\text{m}$ .

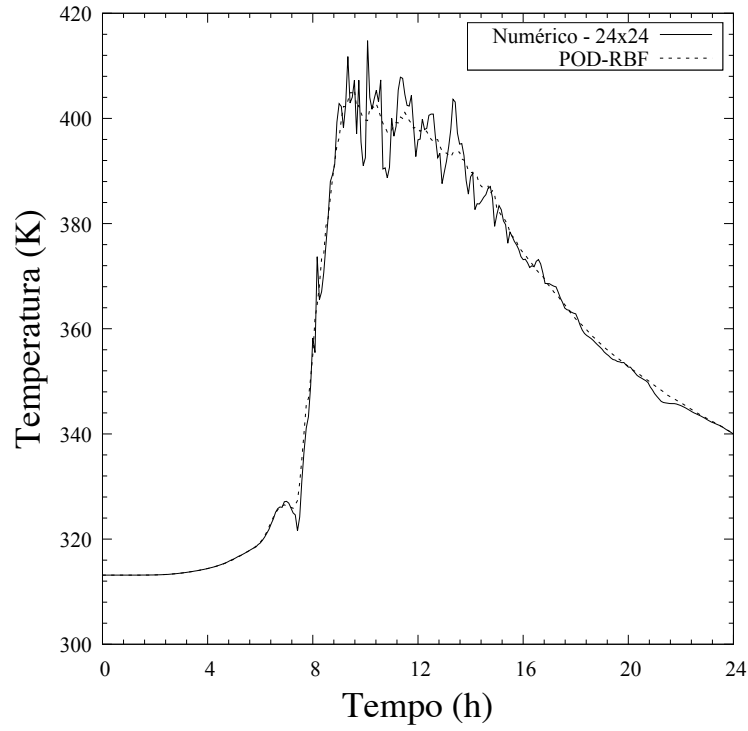


Figura 5.23: Comparação da solução com fluxo exato contra a estimativa de POD-RBF da distribuição de temperatura em  $x = 0,225\text{m}$  e  $y = 0,3\text{m}$ .

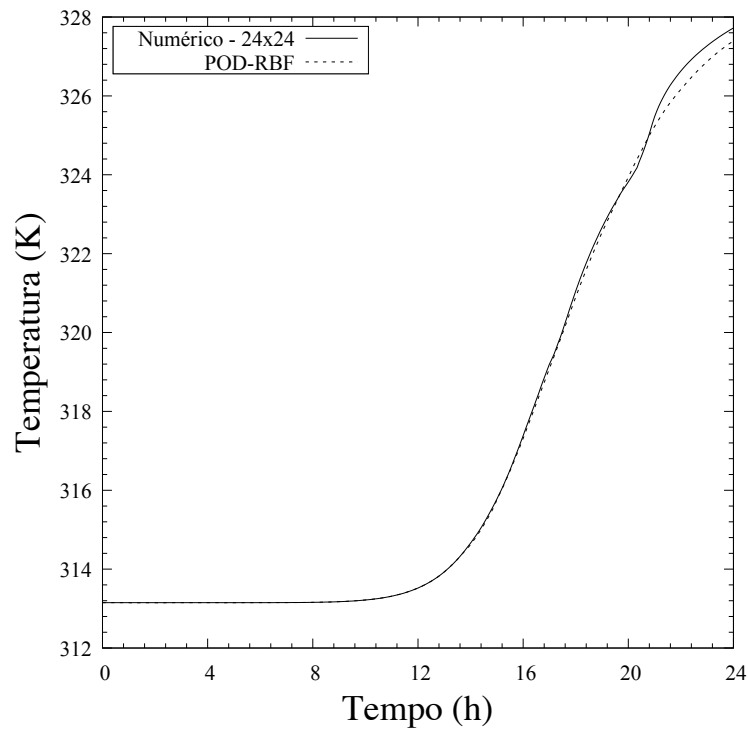


Figura 5.24: Comparação da solução com fluxo exato contra a estimativa de POD-RBF da distribuição de temperatura em  $x = 0,075\text{m}$  e  $y = 0,3\text{m}$ .



Cada simulação realizada para a geração dos instantâneos levou em torno de 12 horas de tempo computacional, enquanto que o tempo desprendido para as realizações de estimativa utilizando o procedimento POD-RBF giram em torno de 2 min. Mesmo sendo necessárias várias horas de esforço para computar todos os instantâneos, a técnica se mostra eficaz devido à rápida solução de problemas após esse estágio inicial. Este procedimento fornece um meio de reduzir o tamanho e a dimensionalidade do problema, ao mesmo tempo que otimiza a precisão da solução a ser determinada. Assim, a utilização do POD-RBF como modelo reduzido é altamente recomendada para procedimentos envolvendo estimativas com as técnicas de Filtro de Partículas, conforme ficará evidente no Capítulo seguinte desta tese.

# Capítulo 6

## Resultados e Discussões

Este capítulo expõe os principais resultados obtidos neste estudo, resolvendo o problema inverso para casos teste unidimensionais e bidimensionais.

Nos casos unidimensionais serão feitas estimativas para as variáveis de estado, a saber: Temperatura, Concentração e Posição da Interface de Mudança de Fase. Dois tipos de medidas simuladas serão utilizadas: Medida simulada de Temperatura e Posição da Interface. As medidas serão simuladas pelo método de entalpia explícito. As estimativas obtidas para as variáveis de estado serão feitas por meio dos filtros SIR, ASIR e LIU & WEST. O filtro de LIU e WEST [12] será utilizado para a estimativa simultânea das variáveis de estado e parâmetros do modelo.

Para os casos bidimensionais, serão utilizadas medidas simuladas de temperatura, sendo estas simuladas pelo modelo completo. O modelo reduzido terá como base o procedimento POD-RBF, Seção 5.3, com o auxílio do AEM para computar os erros de modelo. Serão apresentados casos teste com duas *prioris* diferentes, sendo utilizado o filtro de partícula SIR para a estimativa do fluxo de calor.

### 6.1 Problema Unidimensional

Para analisar os resultados de estimativa de variáveis de estado para o problema unidimensional, foram realizadas várias simulações, com variações no número de partículas do filtro, para o processo de solidificação, o qual obtiveram-se bons resultados. Em todos os casos teste, para fins de comparação, será realizado o cálculo do erro quadrático médio (RMS do inglês *root mean square*), o qual é definido por:

$$\epsilon_{\text{RMS}} = \sqrt{\frac{1}{\mathcal{M}} \sum_{i=1}^{\mathcal{M}} [\mathcal{V}_{\text{est}}(i) - \mathcal{V}_{\text{exa}}]^2}. \quad (6.1)$$

onde  $\mathcal{V}_{\text{est}}$  representa as variáveis de estado estimadas,  $\mathcal{V}_{\text{exa}}$  os valores exatos do problema e  $\mathcal{M}$  o número de medidas transientes.

Nas estimativas, foram utilizadas 100, 500 ou 1.000 partículas e foram feitas 30 ou 50 repetições para cálculo do  $\epsilon_{\text{RMS}}$ , obtendo assim, a média  $\bar{\epsilon}_{\text{RMS}}$  e o desvio-padrão  $\sigma_{\text{RMS}}$  dos erros RMS para todos os casos.

No procedimento assume-se que as medições simuladas e o modelo matemático têm ruído Gaussiano, não correlacionado, com média zero e com desvio padrão conhecido. Para as apreciações dos resultados, o intervalo de credibilidade de 99% definido na Eq. (6.2) foi utilizado.

$$\text{IC} = \mathcal{V}_{est} \pm 2,576\sigma_{est} \quad (6.2)$$

onde  $\sigma_{est}$  é o desvio padrão das partículas geradas.

## Estimativa de Variáveis de Estado para o processo de Solidificação

Para a estimativa das variáveis de estado considera-se o domínio descrito na Seção 3.1.6. Para essa análise será utilizado os dados usados em VOLLER [72] apresentados na Seção 5.1.2.

Para a solução do problema de estimativa de estado, as medições foram assumidas disponíveis a partir de um único sensor, localizado na posição  $\chi = 1,5$ . As medidas foram geradas da solução do problema direto com parâmetros especificados anteriormente.

### Medida Simulada de Temperatura

A medida simulada para a solução do problema inverso aqui é considerada como sendo a medida de temperatura analítica, fornecida pelas Eqs. (3.24) e (3.26). A fim de lidar com as incertezas deste modelo de evolução, por exemplo, nas propriedades termo-físicas, ruídos Gaussianos, não correlacionados, com média zero e desvio padrão de 5% do máximo valor de temperatura ( $|\Theta_{\text{max}}|$ ) foram adicionados no problema de transferência de calor. As medições foram supostas disponíveis a cada 50 intervalos de tempo. A discretização numérica do problema de transferência de calor resolvido nas Eqs. (3.36) - (3.37) constitui o modelo de evolução.

### Estimativa de Variáveis de Estado com Filtro SIR e ASIR

Para o cálculo das estimativas de estado são consideradas o campo variáveis de estado: temperatura, concentração e o movimento da interface de mudança de fase. São analisados os filtros de partículas SIR e ASIR, ambos com 100, 500 e 1.000 partículas. Os transientes de temperatura e concentração em  $\chi = 1,5$  são apresentados. São apresentados também os perfis de temperatura e concentração no

instante  $\tau = 1, 5$ . Em decorrência destas estimativas, também é aqui apresentado o movimento da interface sólido-líquido ( $\varsigma(\tau)$ ). Os resultados apresentados constituem as simulações para 3% do máximo valor de temperatura ( $|\Theta_{\text{Max}}|$ ), 1% do máximo valor de concentração ( $|\phi_{\text{Max}}|$ ) e 1% do máximo valor da interface ( $|\varsigma_{\text{Max}}|$ ) nos desvios padrões de modelo de evolução de estado.

Na Tab. 6.1 os resultados das médias e dos desvios-padrão do RMS são apresentados para cada caso. Nesta tabela pode-se observar o tempo computacional despendido para a realização das simulações. Nota-se que o filtro SIR apresentou um baixo custo computacional para a realização da estimativa se comparado com o filtro ASIR. Isto se deve ao fato de que o filtro ASIR tem duas fases de amostragem, uma antes e outra após a reamostragem. Entretanto, o filtro ASIR apresentou os melhores resultados nos casos testados, inclusive com um número menor de partículas, onde se observa que o erro RMS é menor que no filtro SIR, fato este que pode ser comprovado observando-se os respectivos desvios padrões para os erros RMS.

Tabela 6.1: Resultados RMS da Estimativa de Estado com Medida de Temperatura.

Caso	Filtro	Número de Partículas	Tempo CPU	RMS	Temperatura	Concentração	Interface
1	SIR	100	3h	$\bar{\epsilon}_{\text{RMS}}$	$2,921 \times 10^{-3}$	$2,746 \times 10^{-1}$	$3,940 \times 10^{-3}$
				$\sigma_{\text{RMS}}$	$2,489 \times 10^{-5}$	$7,412 \times 10^{-5}$	$3,722 \times 10^{-5}$
2		500	15h	$\bar{\epsilon}_{\text{RMS}}$	$2,823 \times 10^{-3}$	$2,746 \times 10^{-1}$	$3,480 \times 10^{-3}$
				$\sigma_{\text{RMS}}$	$4,590 \times 10^{-6}$	$1,457 \times 10^{-5}$	$8,170 \times 10^{-6}$
3		1.000	31h	$\bar{\epsilon}_{\text{RMS}}$	$2,813 \times 10^{-3}$	$2,746 \times 10^{-1}$	$3,424 \times 10^{-3}$
				$\sigma_{\text{RMS}}$	$2,440 \times 10^{-6}$	$6,870 \times 10^{-6}$	$4,060 \times 10^{-6}$
4	ASIR	100	5h	$\bar{\epsilon}_{\text{RMS}}$	$2,901 \times 10^{-3}$	$2,746 \times 10^{-1}$	$3,898 \times 10^{-3}$
				$\sigma_{\text{RMS}}$	$2,145 \times 10^{-5}$	$7,440 \times 10^{-5}$	$4,056 \times 10^{-5}$
5		500	22h	$\bar{\epsilon}_{\text{RMS}}$	$2,820 \times 10^{-3}$	$2,746 \times 10^{-1}$	$3,472 \times 10^{-3}$
				$\sigma_{\text{RMS}}$	$4,250 \times 10^{-6}$	$1,288 \times 10^{-5}$	$8,200 \times 10^{-6}$
6		1.000	45h	$\bar{\epsilon}_{\text{RMS}}$	$2,810 \times 10^{-3}$	$2,746 \times 10^{-1}$	$3,422 \times 10^{-3}$
				$\sigma_{\text{RMS}}$	$2,110 \times 10^{-6}$	$5,780 \times 10^{-6}$	$4,350 \times 10^{-6}$

Nas Figs. 6.1 a 6.10 as melhores soluções do problema de estimativa de estado para cada filtro, SIR e ASIR, com 5%  $|\Theta_{\text{Max}}|$  de desvio padrão nas medidas e 3%  $|\Theta_{\text{Max}}|$ , 1%  $|\varsigma_{\text{Max}}|$  e 1%  $|\phi_{\text{Max}}|$  de desvios padrões de modelo, são apresentadas, respectivamente.

As Figs. 6.1 a 6.5 apresentam a temperatura, concentração e interface estimadas

para o filtro SIR com 1.000 partículas. A Fig. 6.1 mostra a variação de temperatura na posição  $\chi = 1,5$ , ponto onde se dispõe de medidas. Nota-se que a temperatura estimada é mais próxima das temperaturas exatas que as medidas simuladas. A Fig. 6.2 mostra a variação de temperatura estimadas ao longo de todo o domínio quando a interface se encontra no instante  $\varsigma = 1,74$ , onde se observa que esta se encontra próxima à temperatura exata. A Fig. 6.3 apresenta o campo de concentração estimada na posição  $\chi = 1,5$ , onde observa-se que o estimado capta bem o salto da solução, para a mudança de fase. Na Fig. 6.4 observa-se que a variação de concentração estimada, ao longo de todo o domínio quando a interface se encontra no instante  $\varsigma = 1,74$ , se encontra próxima à concentração exata. Em todos os teste apresentados para o filtro SIR, com medida de temperatura, as estimativas para a variação de temperatura obtiveram boas concordâncias com as temperaturas exatas. Apesar do tempo computacional elevado, pode-se observar uma excelente concordância dos resultados apresentados.

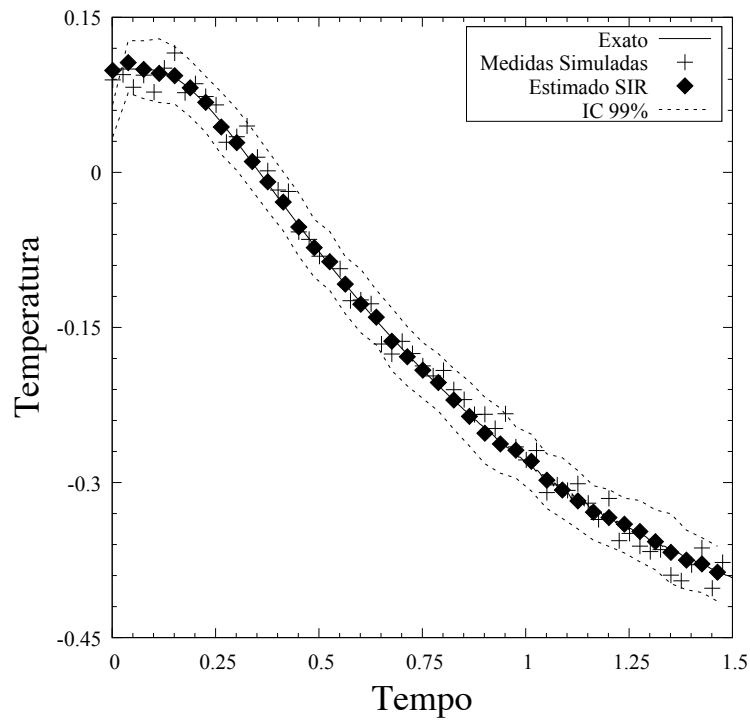


Figura 6.1: Histórico da Temperatura em  $\chi = 1,5$ , Caso 3.

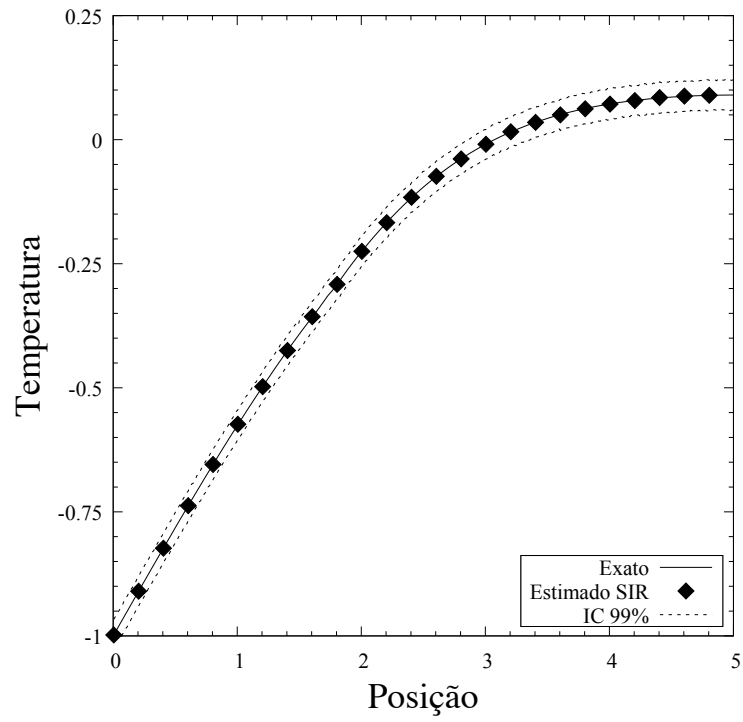


Figura 6.2: Perfil de Temperatura quando  $\varsigma = 1,74$ , Caso 3.

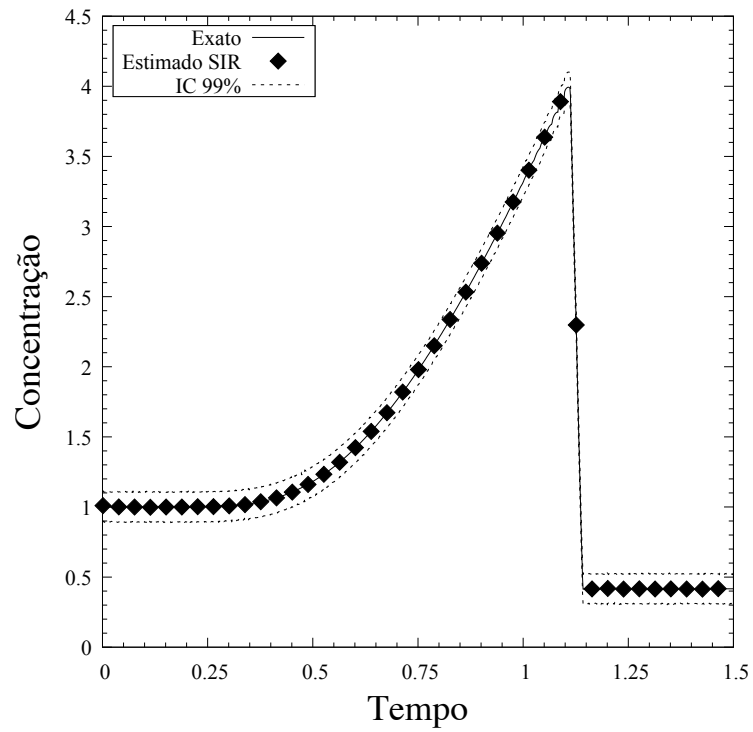


Figura 6.3: Histórico da Concentração em  $\chi = 1,5$ , Caso 3.

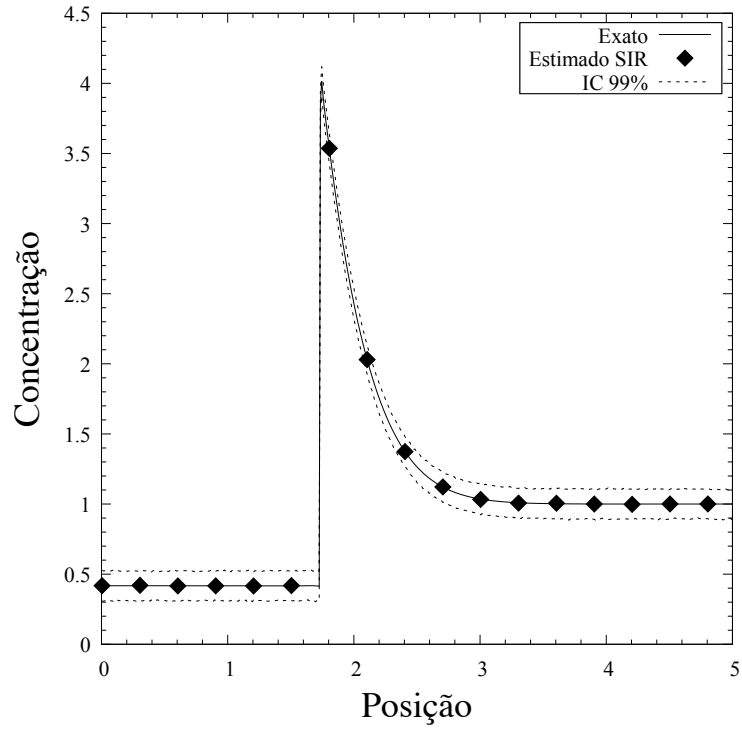


Figura 6.4: Perfil de Concentração quando  $\varsigma = 1,74$ , Caso 3.

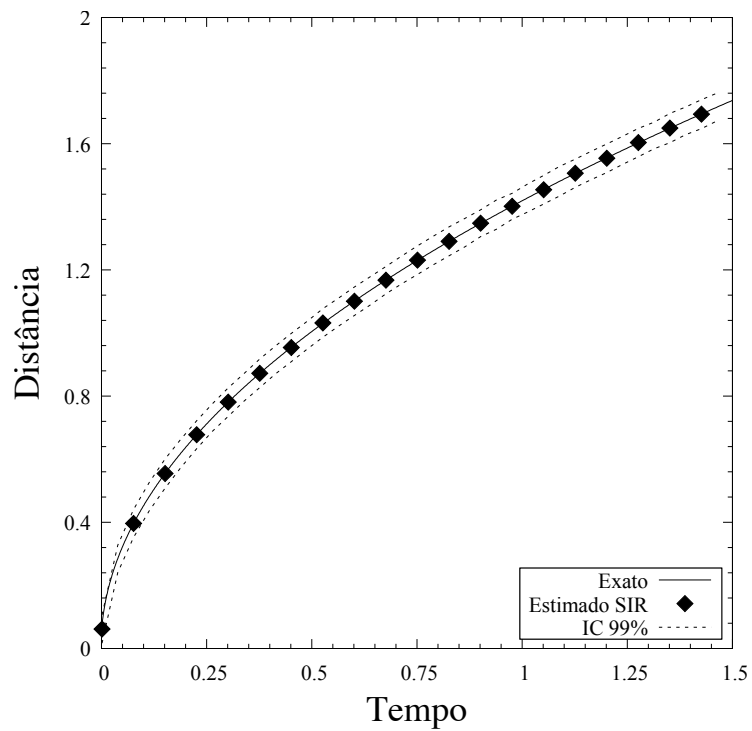


Figura 6.5: Movimento da Interface  $\varsigma(\tau)$ , Caso 3.

As Figs. 6.6 a 6.10 apresentam a temperatura, concentração e interface estimadas para o filtro ASIR com 1.000 partículas. Como nos testes com o filtro SIR,

as estimativas para a variação de temperatura no mesmo ponto especificado, e o campo de temperatura têm uma excelente concordância com a temperatura exata. A Fig. 6.8 apresenta a estimativa para o campo de concentração em  $\chi = 1,5$ , onde observa-se que o estimado capta bem o salto do solução quando analisado frente a sua solução exata, havendo uma pequena diferença na região de mudança de fase. Na Fig. 6.9 observa-se que a variação da concentração estimada, ao longo de todo o domínio quando a interface se encontra no instante  $\varsigma = 1,74$ , se encontra próxima à concentração exata. A Fig. 6.10 apresenta a estimativa do movimento de interface que também apresenta uma boa concordância com a frente de solidificação exata.

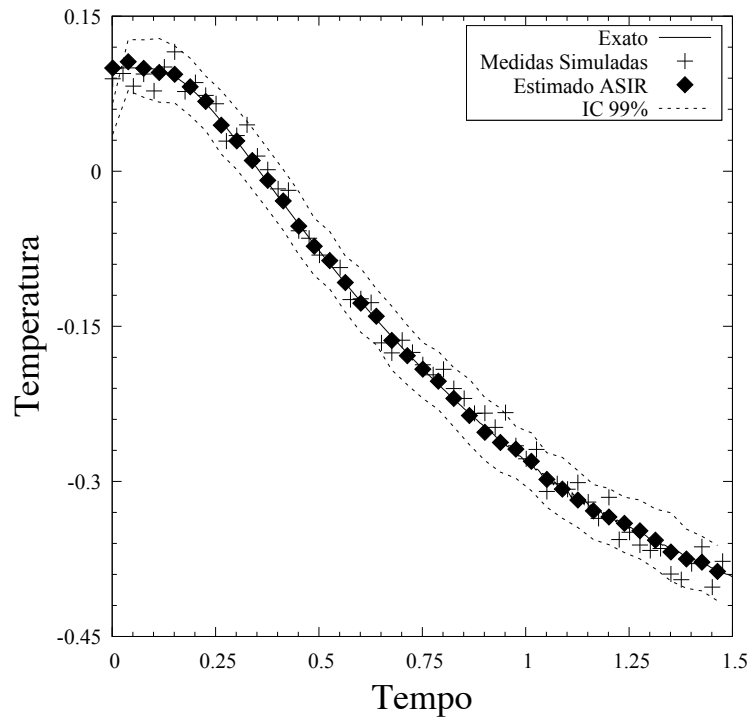


Figura 6.6: Histórico da Temperatura em  $\chi = 1,5$ , Caso 6.



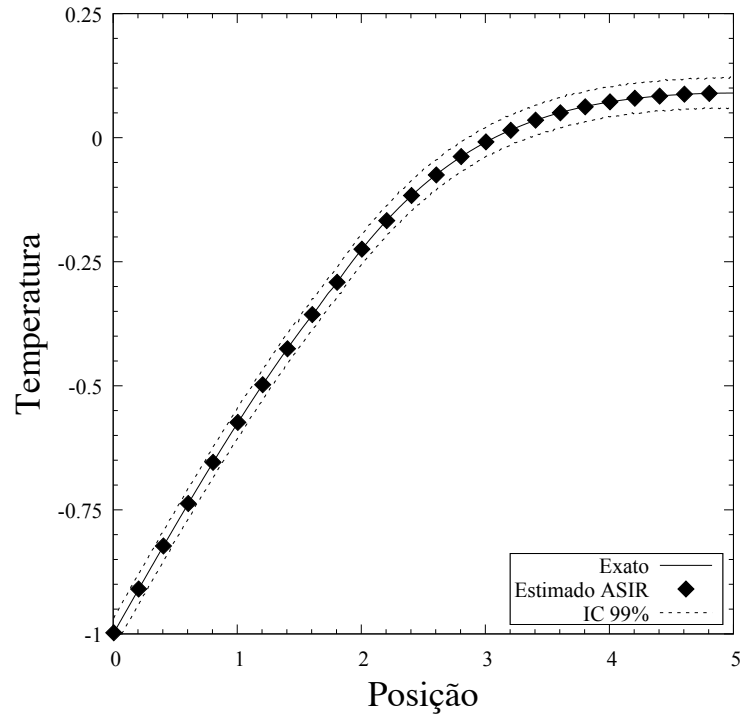


Figura 6.7: Perfil de Temperatura quando  $\varsigma = 1,74$ , Caso 6.

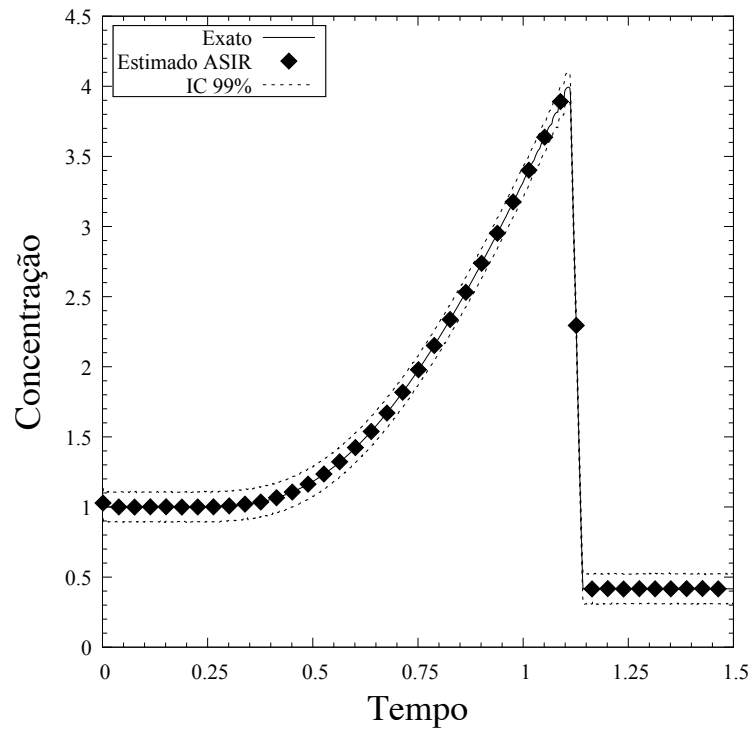


Figura 6.8: Histórico da Concentração em  $\chi = 1,5$ , Caso 6.

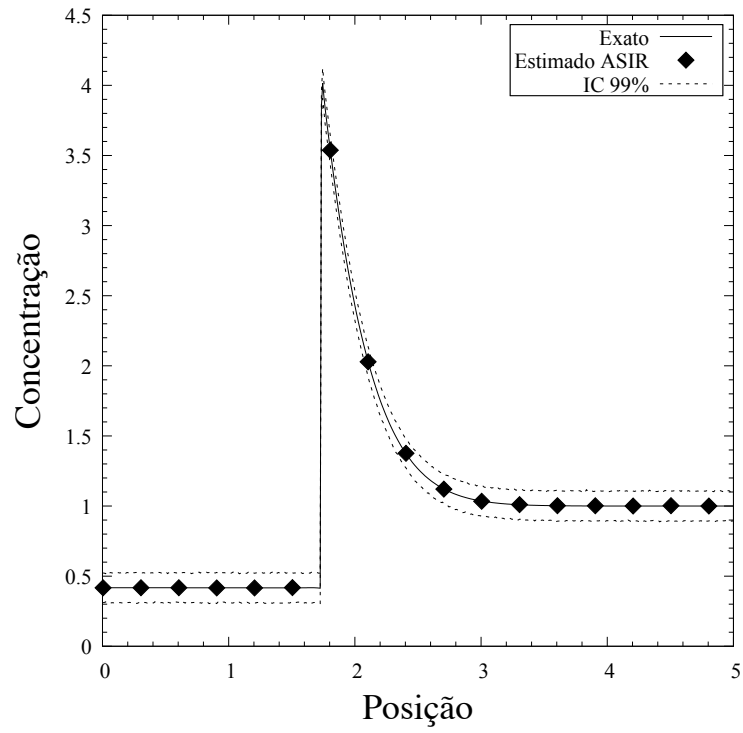


Figura 6.9: Perfil de Concentração quando  $\varsigma = 1,74$ , Caso 6.

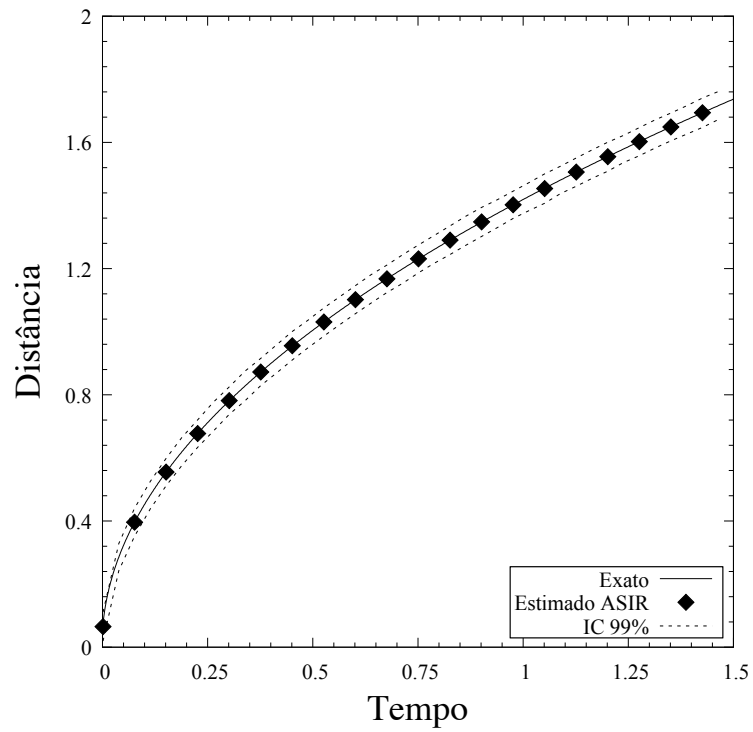


Figura 6.10: Movimento da Interface  $\varsigma(\tau)$ , Caso 6.

## Medida Simulada da Posição da Interface

A medida simulada para a solução do problema inverso aqui é considerada como sendo a medida do movimento da interface, fornecido pela Eq. (3.28). A fim de lidar com as incertezas deste modelo de evolução, por exemplo, nas propriedades termofísicas, ruídos Gaussianos, não correlacionados, com média zero e desvio padrão de 5% do máximo valor da frente de mudança de fase ( $|\zeta_{\text{Max}}|$ ) foram adicionados no problema de transferência de calor. As medições foram supostas disponíveis a cada 50 intervalos de tempo. A discretização numérica do problema de transferência de calor resolvido nas Eqs. (3.36) - (3.37) constitui o modelo de evolução para o transiente do campo.

## Estimativa de Variáveis de Estado com Filtro SIR e ASIR

O cálculo das estimativas de estado levam em consideração o campo de temperatura, concentração e o movimento da interface de mudança de fase como variáveis de estado. Neste problema são utilizadas 100, 500 ou 1000 partículas para os cálculos dos filtros SIR e ASIR, apresentando os transientes de temperatura e concentração em  $\chi = 1, 5$ . Os perfis de temperatura e concentração no instante  $\tau = 1, 5$  também é aqui apresentado. Em decorrência destas estimativas, também é apresentado o movimento da interface sólido-líquido ( $\zeta(\tau)$ ). Os resultados apresentados constituem as simulações para 3% do máximo valor de temperatura ( $|\Theta_{\text{Max}}|$ ), 1% do máximo valor de movimento da interface ( $|\zeta_{\text{Max}}|$ ) e 1% do máximo valor de concentração ( $|\phi_{\text{Max}}|$ ) nos desvios padrões de modelo de evolução.

Na Tab. 6.2 os resultados da média do RMS e tempo computacional são apresentados para cada caso. Observa-se que os resultados explicitam que o filtro SIR apresentou um custo computacional mais baixo para a realização da estimativa ao ser comparado com o filtro ASIR. Como na seção anterior, isto ocorre devido ao filtro ASIR possuir duas fases de amostragem, uma antes e outra após a reamostragem.

Ao comparar as Tabs. 6.2 e 6.1 observa-se que para quantidades pequenas de partículas as estimativas considerando a medida movimento da Interface obtiveram os melhores resultados, porém, com o aumento do número de partículas, as medidas simuladas de temperatura obtém os melhores resultados para as medidas de temperatura e concentração. Entretanto, as estimativas da interface tem seus melhores resultados estimados quando ao se considerar a medida simulada de temperatura.

Tabela 6.2: Resultados RMS da Estimativa de Estado com Medida do Movimento da Interface.

Caso	Filtro	Número de Partículas	Tempo CPU	RMS	Temperatura	Concentração	Interface
7	SIR	100	2h	$\bar{\epsilon}_{\text{RMS}}$	$1,243 \times 10^{-3}$	$2,746 \times 10^{-1}$	$4,895 \times 10^{-3}$
				$\sigma_{\text{RMS}}$	$1,592 \times 10^{-5}$	$6,427 \times 10^{-5}$	$3,647 \times 10^{-5}$
8		500	8h	$\bar{\epsilon}_{\text{RMS}}$	$9,621 \times 10^{-4}$	$2,746 \times 10^{-1}$	$4,601 \times 10^{-3}$
				$\sigma_{\text{RMS}}$	$3,822 \times 10^{-6}$	$1,231 \times 10^{-5}$	$8,491 \times 10^{-6}$
9		1.000	15h	$\bar{\epsilon}_{\text{RMS}}$	$9,177 \times 10^{-4}$	$2,746 \times 10^{-1}$	$4,571 \times 10^{-3}$
				$\sigma_{\text{RMS}}$	$1,746 \times 10^{-6}$	$4,943 \times 10^{-6}$	$4,245 \times 10^{-6}$
10		100	4h	$\bar{\epsilon}_{\text{RMS}}$	$1,218 \times 10^{-3}$	$2,746 \times 10^{-1}$	$4,839 \times 10^{-3}$
				$\sigma_{\text{RMS}}$	$1,236 \times 10^{-5}$	$5,742 \times 10^{-5}$	$3,728 \times 10^{-5}$
11		500	13h	$\bar{\epsilon}_{\text{RMS}}$	$9,524 \times 10^{-4}$	$2,746 \times 10^{-1}$	$4,596 \times 10^{-3}$
				$\sigma_{\text{RMS}}$	$3,730 \times 10^{-6}$	$1,344 \times 10^{-5}$	$6,680 \times 10^{-6}$
12		1.000	24h	$\bar{\epsilon}_{\text{RMS}}$	$9,132 \times 10^{-4}$	$2,745 \times 10^{-1}$	$4,568 \times 10^{-3}$
				$\sigma_{\text{RMS}}$	$2,030 \times 10^{-6}$	$5,790 \times 10^{-6}$	$3,520 \times 10^{-6}$

Nas Figs. 6.11 - 6.20 as soluções do problema de estimativa de estado dos filtros SIR e ASIR com 100, 500 ou 1000 partículas, com 5%  $|\Theta_{\text{Max}}|$  de desvio padrão nas medidas e 3%  $|\Theta_{\text{Max}}|$ , 1%  $|\varsigma_{\text{Max}}|$  e 1%  $|\phi_{\text{Max}}|$  de desvios padrão de modelo são apresentadas.

Nas Figs. 6.11 - 6.15 são apresentadas a temperatura, concentração e interface estimadas para o filtro SIR com 1000 partículas. A Fig. 6.11 mostra o transiente de temperatura na posição  $\chi = 1,5$ , ponto onde se dispõe de medidas. Nota-se que a temperatura estimada é mais próxima das temperaturas exatas que as medidas simuladas. A Fig. 6.12 mostra o transiente de temperatura estimadas ao longo de todo o domínio quando a interface se encontra no instante  $\varsigma = 1,74$ , onde se observa que esta se encontra próxima à temperatura exata. A Fig. 6.13 apresenta o campo de concentração estimado na posição  $\chi = 1,5$ , onde observa-se que o estimado capta bem o salto da solução, para a mudança de fase. Na Fig. 6.14 observa-se que o transiente de concentração estimado, ao longo de todo o domínio quando a interface se encontra no instante  $\varsigma = 1,74$ , se encontra próxima à concentração exata. A Fig. 6.15 apresenta a estimativa do movimento da interface que também apresenta uma boa concordância com a frente de solidificação exata.

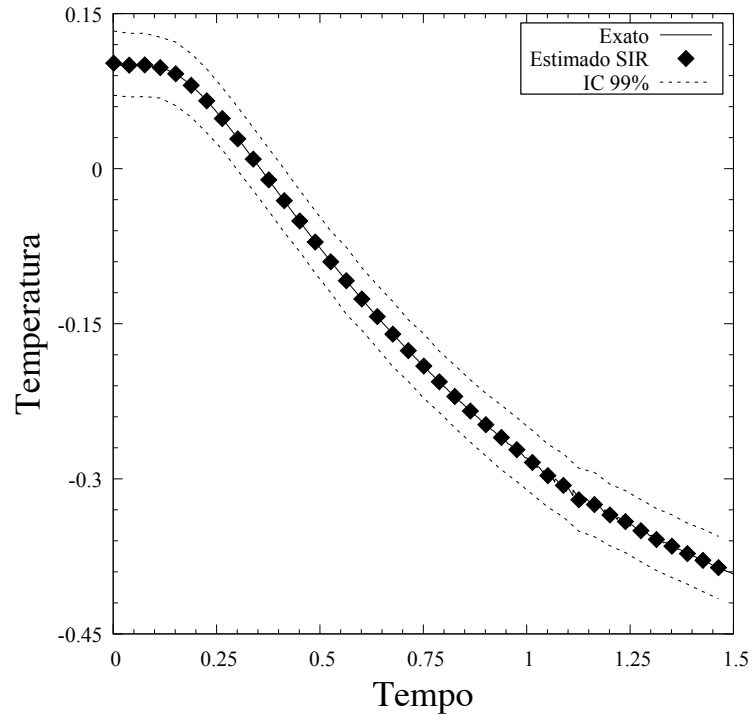


Figura 6.11: Histórico da Temperatura em  $\chi = 1, 5$ , Caso 9.

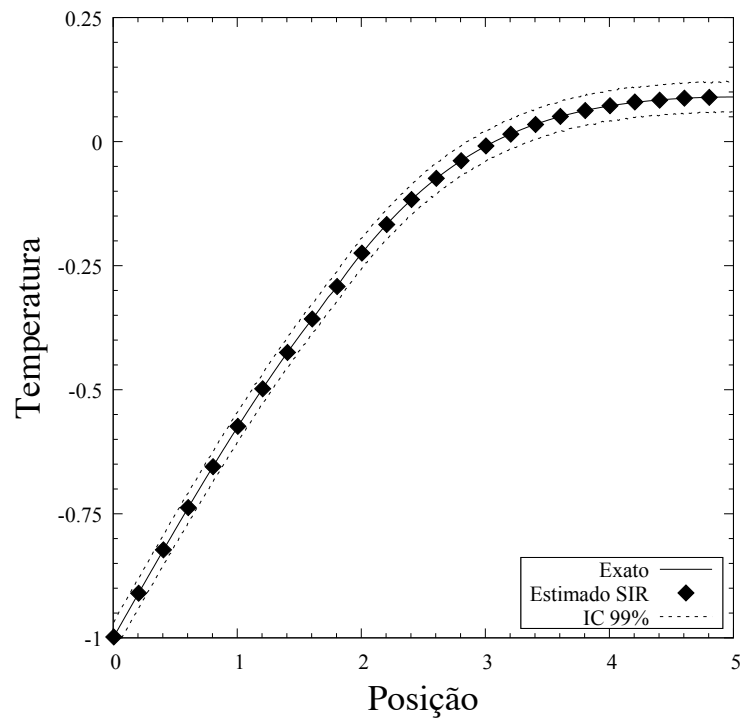


Figura 6.12: Perfil de Temperatura quando  $\varsigma = 1, 74$ , Caso 9.

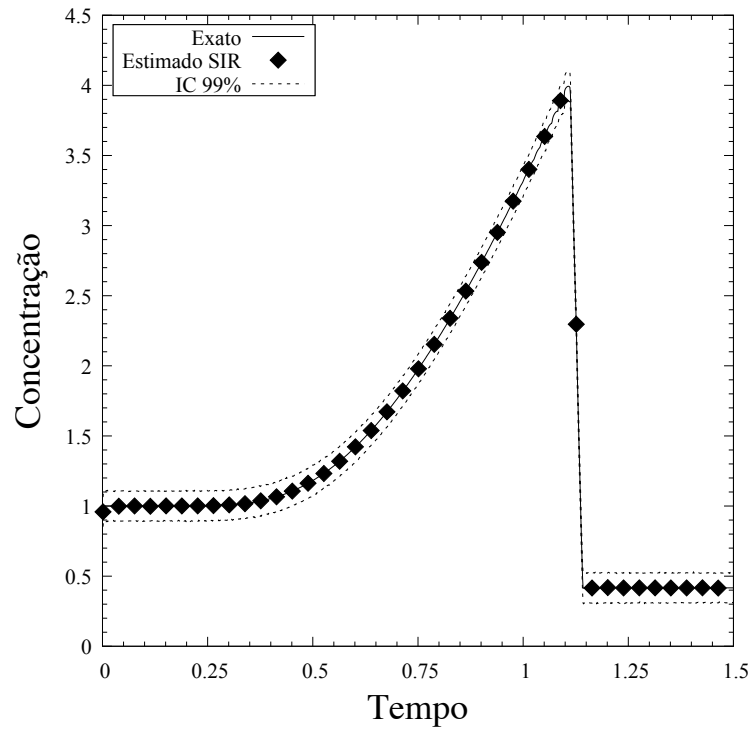


Figura 6.13: Histórico da Concentração em  $\chi = 1,5$ , Caso 9.

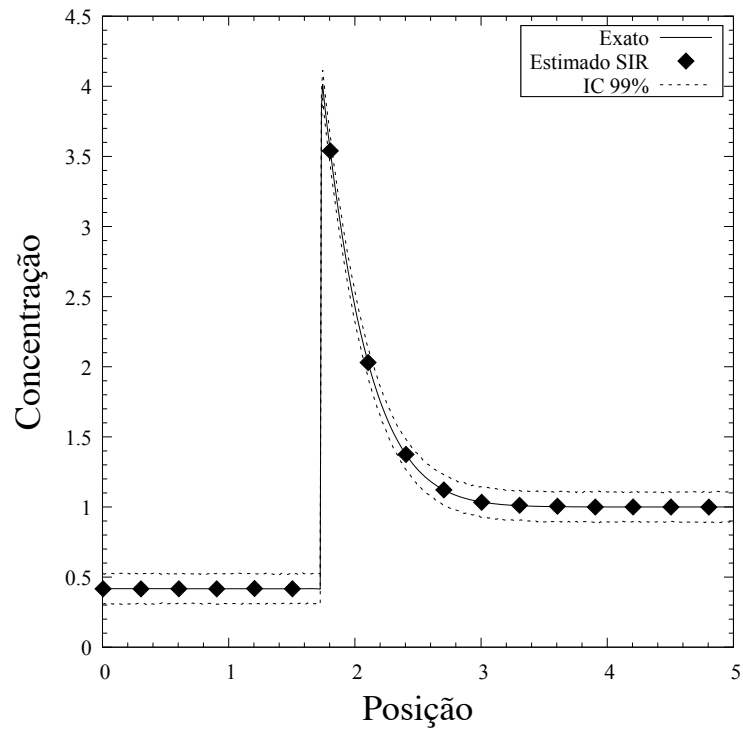


Figura 6.14: Perfil de Concentração quando  $\varsigma = 1,74$ , Caso 9.

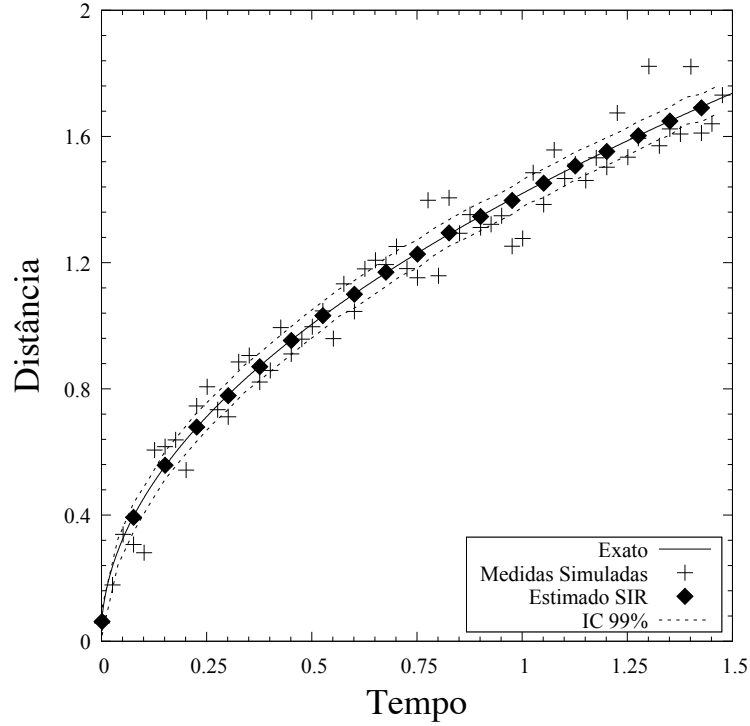


Figura 6.15: Movimento da Interface  $\zeta(\tau)$ , Caso 9.

As Figs. 6.16 - 6.20 apresentam a temperatura, concentração e interface estimadas para o filtro ASIR com 1000 partículas. Como em todos os teste apresentados até o momento, as estimativas para o transiente de temperatura obtiveram boas concordâncias com as temperaturas exatas. Uma excelente concordância com a temperatura exata é encontrada na Fig. 6.17 quando analisado o transiente de temperatura estimado ao longo de todo o domínio quando a interface se encontra no instante  $\varsigma = 1,74$ . O mesmo pode ser observado na análise do transiente da concentração quando este se encontra na posição  $\chi = 1,5$  (Fig. 6.18), e quando o transiente de concentração estimado ao longo do domínio quando a interface se encontra no instante  $\varsigma = 1,74$  (Fig. 6.19). A Fig. 6.20 apresenta a estimativa do movimento de interface que também apresenta uma boa concordância com a frente de sólido exata. Como pode ser observado, uma melhor estimativa e suavização das oscilações foram obtidas no que se refere a estimativa das variáveis de estado, quando comparadas aos casos anteriores.

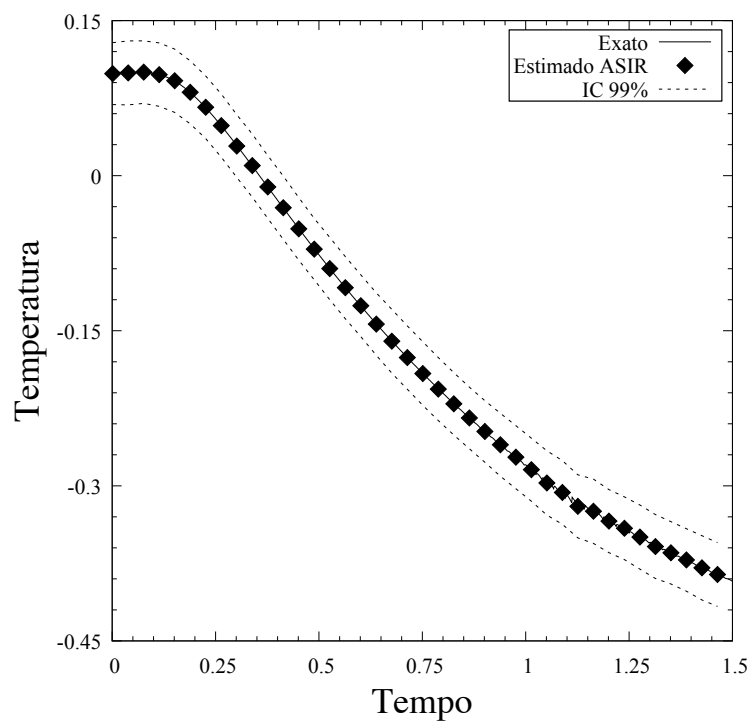


Figura 6.16: Histórico da Temperatura em  $\chi = 1,5$ , Caso 12.

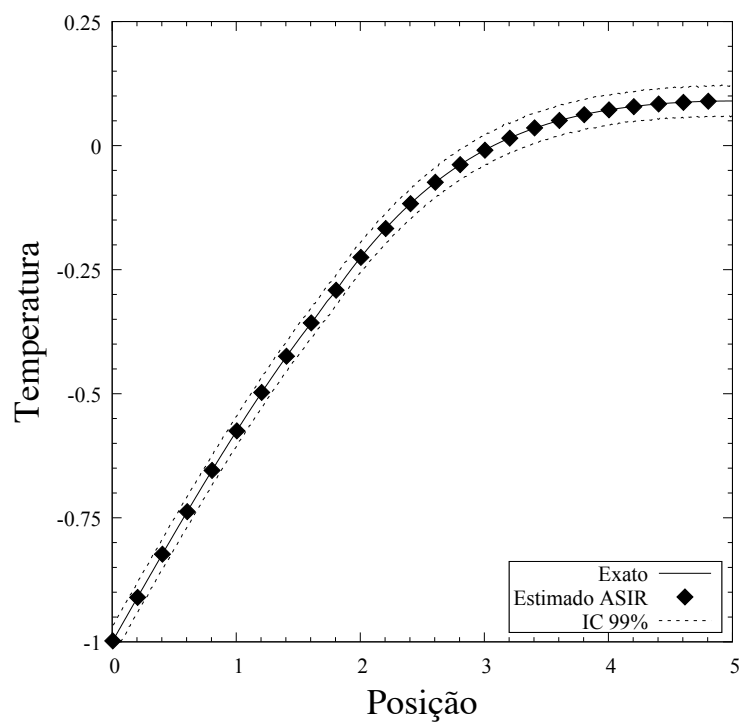


Figura 6.17: Perfil de Temperatura quando  $\varsigma = 1,74$ , Caso 12.



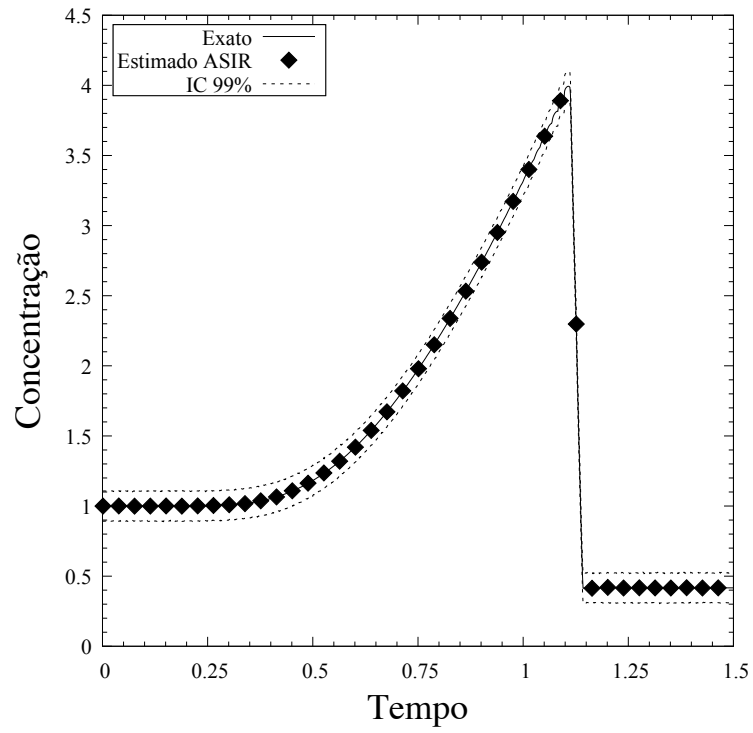


Figura 6.18: Histórico da Concentração em  $\chi = 1,5$ , Caso 12.

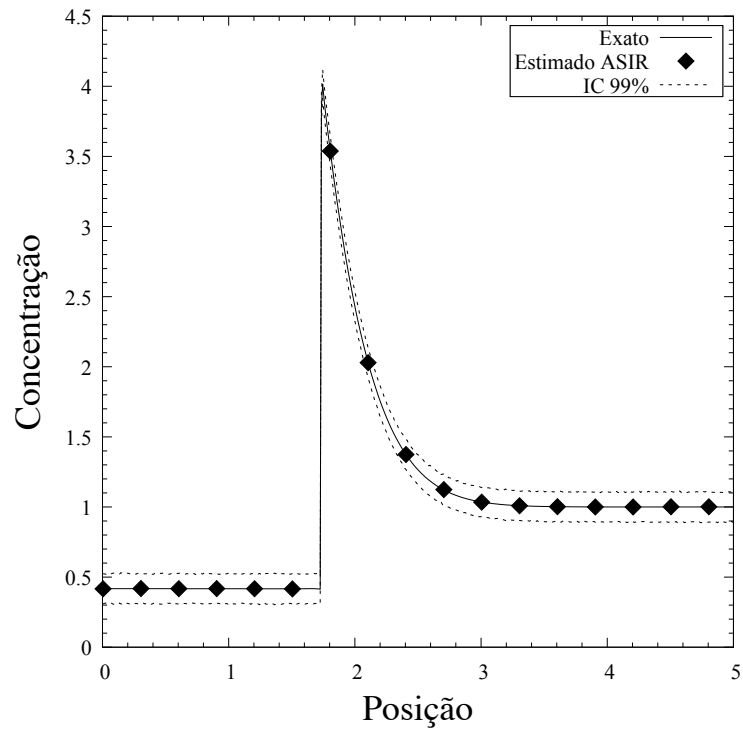


Figura 6.19: Perfil de Concentração quando  $\varsigma = 1,74$ , Caso 12.

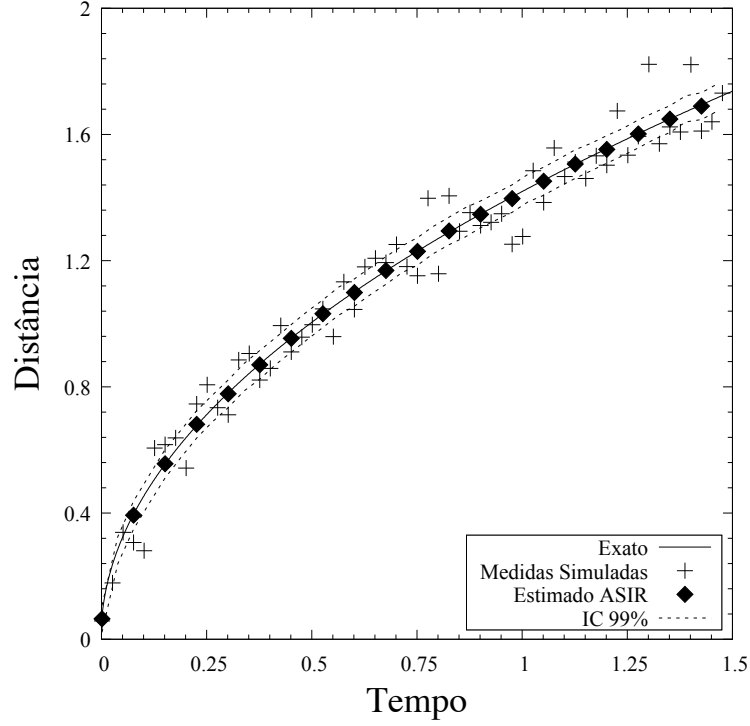


Figura 6.20: Movimento da Interface  $\zeta(\tau)$ , Caso 12.

Ao se analisar os casos apresentados constatou-se que para as estimativas das variáveis de estado, as soluções obtidas através das medidas simuladas de temperatura apresentaram melhores resultados quando comparados com os mesmos casos para as estimativas com medida simulada de movimento da interface. Constatou-se ainda que as estimativas com o Filtro ASIR possuem melhores resultados quando observadas as médias dos erros RMS, porém, ao se observar os desvios padrões dos mesmos erros, consta-se que o Filtro SIR possui as melhores estimativas, o que ainda pode ser corroborado pelo valores dos tempos de CPU empregados para cada técnica de filtro de partícula.

## Medidas Simuladas de Temperatura e Posição de Interface

### Estimativa Combinada de Variáveis de Estado e Parâmetros

O filtro proposto por LIU e WEST [12], como descrito no Capítulo 4, Subseção 4.3.3, permite a estimativa combinada dos parâmetros não dinâmicos do modelo com as variáveis de estado. Os parâmetros do modelo são fixados dentro da função de densidade *a priori* de distribuição Gaussiana. A Eq. (6.3) representa as estatísticas das funções de densidade de probabilidade *a priori* assumidas para as

propriedades do modelo no instante  $\tau = 0$ .

$$\boldsymbol{\theta}_0^i = \boldsymbol{\theta}_{exa}^i + \omega\sigma \quad (6.3)$$

onde  $\omega$  é uma variável randômica com distribuição normal, com média zero e desvio padrão unitário,  $\sigma$  é o desvio padrão que será considerado como 1% de cada parâmetro do vetor  $\boldsymbol{\theta}_{exa}$ .

Para analisar os resultados de estimativa combinada de variáveis de estado e parâmetros, utilizou-se medidas simuladas de temperatura e da posição de interface simultaneamente como uma maneira de obter melhores informações das medidas simuladas. Para estimar as variáveis, foram utilizadas 100, 500 e 1000 partículas, apresentando os resultados do transiente de temperatura e concentração em um ponto específico ( $\chi = 1,5$ ), ponto este onde se dispõe de medidas. São observados também os campos de temperatura, concentração e a evolução da interface sólido-líquido em  $\tau = 1,5$ . Foram realizadas 50 repetições para o cálculo do erro RMS de acordo com a Eq. (6.1). A Tab. 6.3 mostra os resultados de RMS e tempo computacional gerado pelo filtro de partícula para estimativa combinada de variáveis de estado e parâmetros. Nota-se que, no filtro proposto por LIU e WEST [12], enquanto há um aumento no número de partículas, ocorre uma redução no erro RMS e um aumento do tempo computacional. Comparando-se estes resultados com os obtidos nos filtros SIR e ASIR, nota-se que o erro RMS do filtro de LIU e WEST [12] é maior, devido aos parâmetros para o modelo não serem determinísticos e serem estimados simultaneamente com as variáveis de estado. A Tab. 6.4 apresenta resumidamente os valores exatos dos parâmetros contra aos obtidos pelo filtro de Liu & West e as suas respectivas diferenças percentuais

As Figs. 6.21 - 6.25 apresentam os melhores resultados para as estimativas segundo ao apresentado na Tab. 6.3. A solução do problema com medida simultânea de 5%  $|\Theta_{Max}|$  e 5%  $|\varsigma_{Max}|$  de desvio padrão nas medidas e 3%  $|\Theta_{Max}|$ , 1%  $|\varsigma_{Max}|$  e 1%  $|\phi_{Max}|$  de desvios padrão no modelo.

Tabela 6.3: Resultados RMS da Estimativa com medida simultânea de Temperatura e Posição da Interface utilizando o Filtro LIU e WEST [12] no Processo de Solidificação.

Caso	Número de Partículas	Tempo CPU	RMS	Temperatura	Concentração	Interface
13	100	5h	$\bar{\epsilon}_{\text{RMS}}$	$2,015 \times 10^{-3}$	$2,746 \times 10^{-1}$	$4,188 \times 10^{-3}$
			$\sigma_{\text{RMS}}$	$1,630 \times 10^{-5}$	$5,914 \times 10^{-5}$	$3,252 \times 10^{-5}$
14	500	25h	$\bar{\epsilon}_{\text{RMS}}$	$1,874 \times 10^{-3}$	$2,746 \times 10^{-1}$	$3,876 \times 10^{-3}$
			$\sigma_{\text{RMS}}$	$3,560 \times 10^{-6}$	$1,119 \times 10^{-5}$	$7,650 \times 10^{-6}$
15	1.000	49h	$\bar{\epsilon}_{\text{RMS}}$	$1,854 \times 10^{-3}$	$2,746 \times 10^{-1}$	$3,836 \times 10^{-3}$
			$\sigma_{\text{RMS}}$	$1,820 \times 10^{-6}$	$5,060 \times 10^{-6}$	$2,920 \times 10^{-6}$

As Figs. 6.21- 6.25 apresentam a temperatura, concentração e interface estimadas para o filtro de LIU e WEST [12] com 1.000 partículas. A Fig. 6.21 mostra o transiente de temperatura na posição  $\chi = 1,5$ , ponto onde se dispõe de medidas. Nota-se que a temperatura estimada é mais próxima das temperaturas exatas que as medidas simuladas. A Fig. 6.22 mostra o transiente de temperatura estimadas ao longo de todo o domínio quando a interface se encontra no instante  $\varsigma = 1,74$ , onde se observa que esta se encontra próxima à temperatura exata. A Fig. 6.23 apresenta o campo de concentração estimado na posição  $\chi = 1,5$ , onde observa-se que o estimado capta bem o salto da solução, para a mudança de fase. Na Fig. 6.24 observa-se que o transiente de concentração estimado, ao longo de todo o domínio quando a interface se encontra no instante  $\varsigma = 1,74$ , se encontra próxima à concentração exata. A Fig. 6.25 apresenta a estimativa do movimento de interface que também apresenta uma boa concordância com a frente de solidificação exata.

As estimativas têm excelente concordância com os parâmetros exatos os quais se encaixam bem no intervalo de confiança, além de ter uma melhor precisão em relação às estimativas obtidas no filtro de LIU e WEST [12] com 100 e 500 partículas.

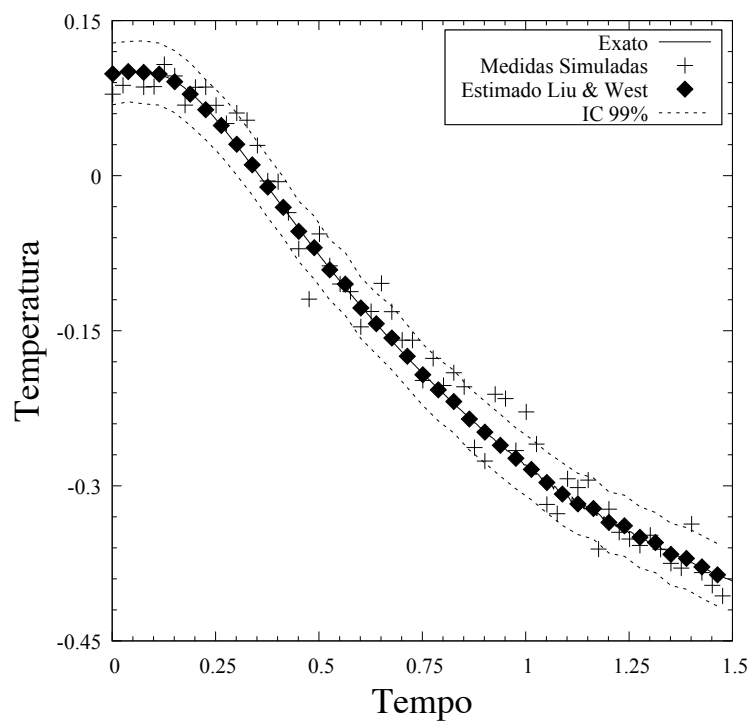


Figura 6.21: Histórico da Temperatura em  $\chi = 1,5$ , Caso 15.

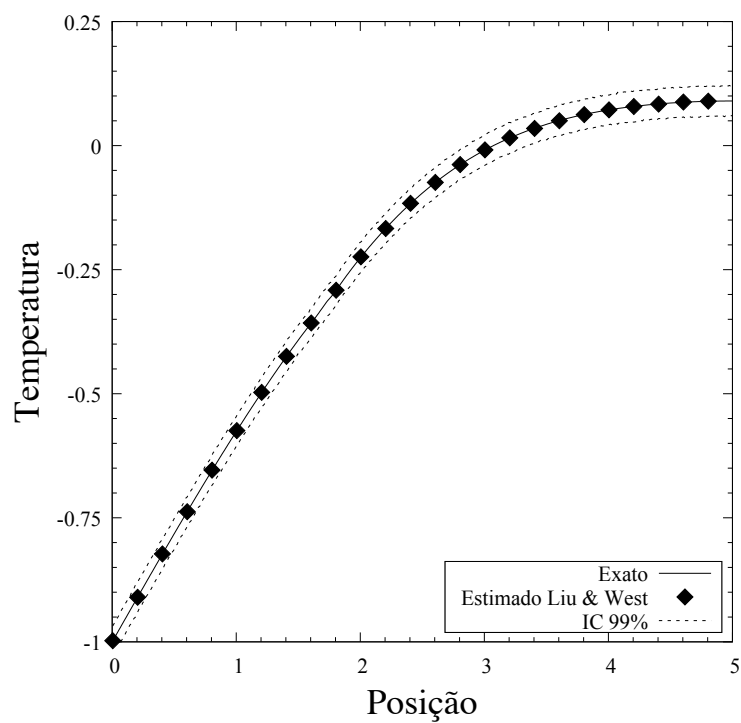


Figura 6.22: Perfil de Temperatura quando  $\varsigma = 1,74$ , Caso 15.

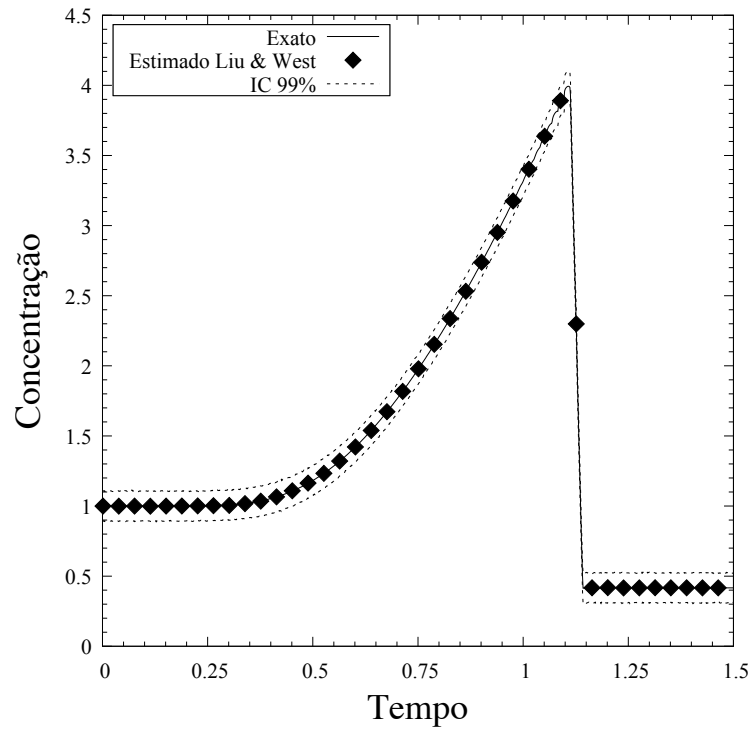


Figura 6.23: Histórico da Concentração em  $\chi = 1,5$ , Caso 15.

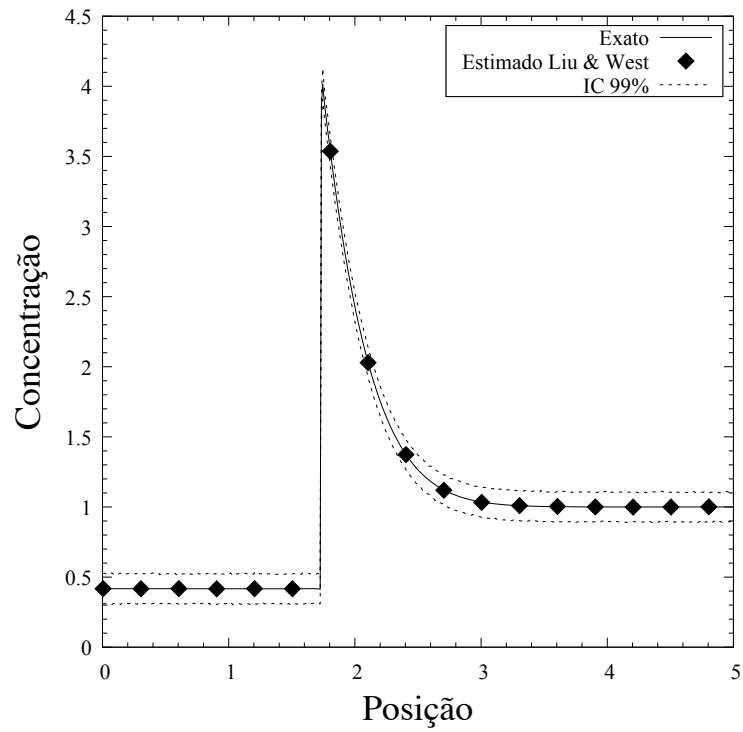


Figura 6.24: Perfil de Concentração quando  $\varsigma = 1,74$ , Caso 15.

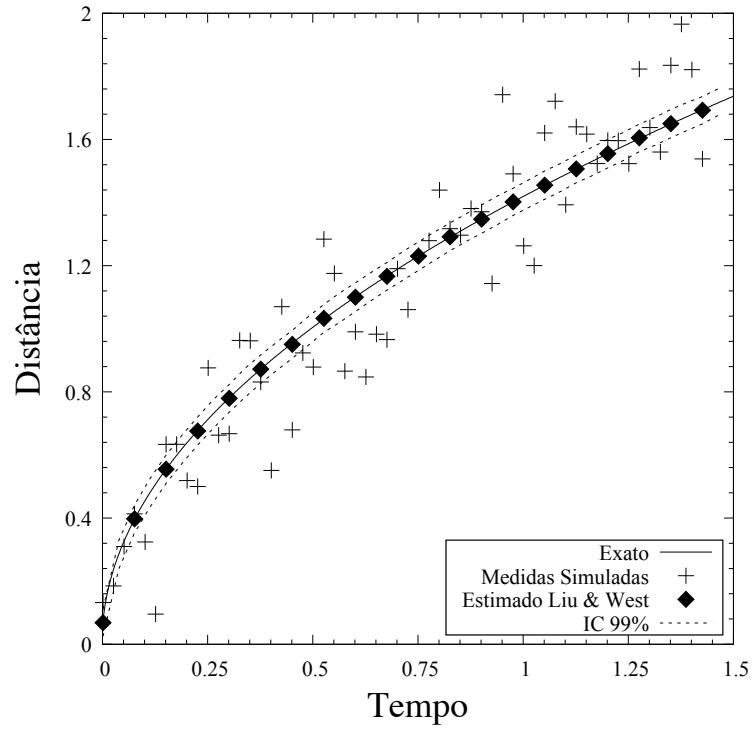
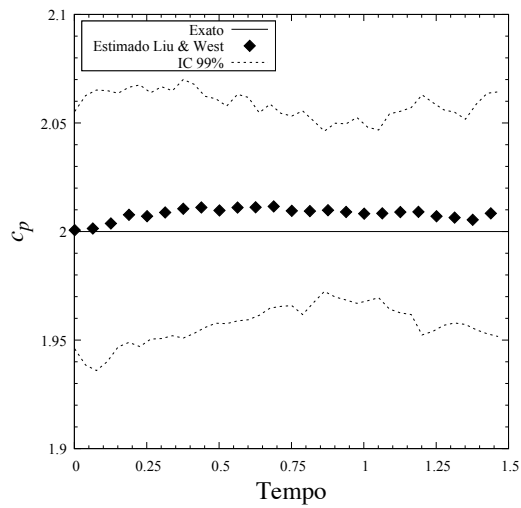


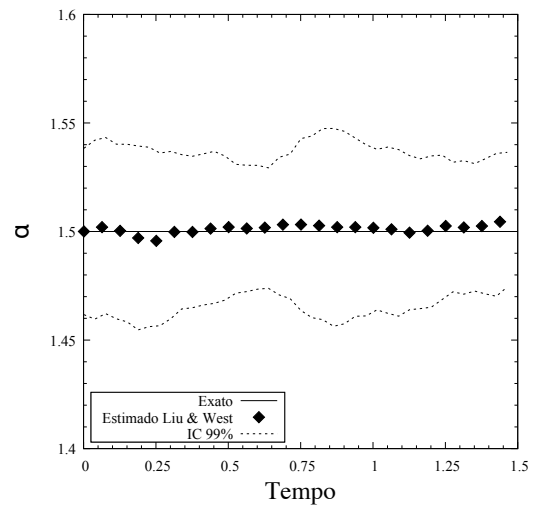
Figura 6.25: Movimento da Interface  $\zeta(\tau)$ , Caso 15.

Tabela 6.4: Parâmetros Exatos e Estimados, Caso 15.

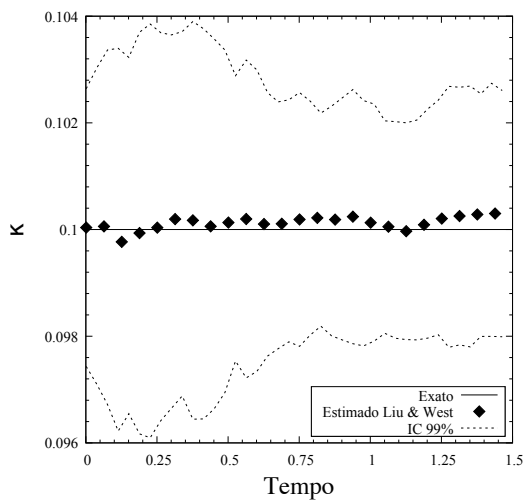
Parâmetro	$c_p$	$\alpha$	$\kappa$	$Le$	$D$	$St$
Exato	2	1,5	0,1	4	4	-0,1
Estimado	1,818	1,517	0,096	3,848	3,931	-0,101
Diferença(%)	9,1	1,7	4	3,8	1,725	1



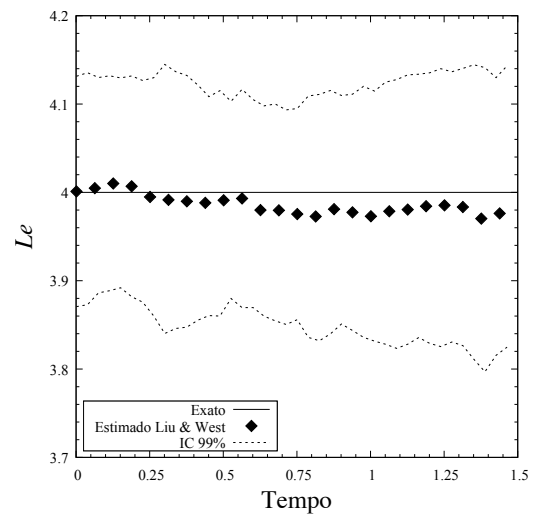
(a)  $c_p$



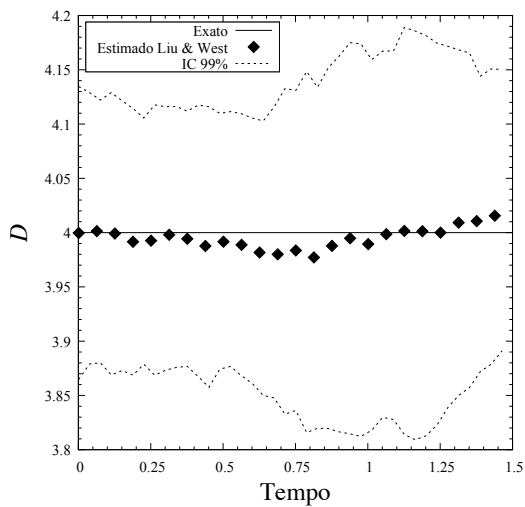
(b)  $\alpha$



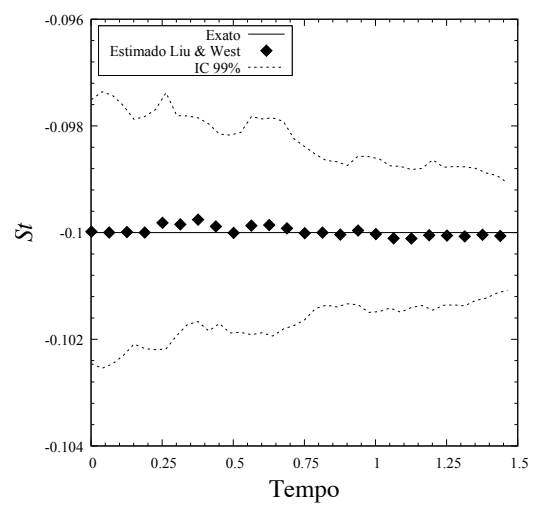
(c)  $\kappa$



(d)  $Le$



(e)  $D$



(f)  $St$

Figura 6.26: Estimativa de Parâmetros, Caso 15.



Similarmente ao apresentado para os filtros SIR e ASIR, foram mostrados exemplos com desvio padrão para as medidas de 5%  $|\Theta_{\text{Max}}|$  e 5%  $|\varsigma_{\text{Max}}|$ , com desvio padrão do modelo de 3%  $|\Theta_{\text{Max}}|$ , 1%  $|\varsigma_{\text{Max}}|$  e 1%  $|\phi_{\text{Max}}|$ . Na Tab. 6.3 os resultados da média do RMS e tempo computacional são apresentados para cada caso. Nota-se que estes resultados dos casos 17 e 19 comparados com o caso 14, têm menor erro RMS, já que o desvio padrão do modelo é menor. No caso 18 comparado com o caso 14, nota-se quando o desvio padrão nas medidas é menor, o erro RMS é maior, porque as estimativas acreditam mais nas medidas.

## 6.2 Problema Bidimensional

Nesta seção, o problema inverso bidimensional com as medidas sendo simuladas com o modelo completo e com o tamanho de malha obtido durante a verificação da solução, consistindo de 24 volumes em ambas as direções  $x$  e  $y$ . O objetivo desta seção será apresentar as estimativas obtidas com a formulação pelo procedimento POD-RBF, utilizando o AEM para obter os erros de modelos inerentes a simulação por POD-RBF.

O problema é resolvido de maneira a estimar a energia acumulada e a temperatura, utilizando a técnica de Filtro de Partículas SIR. Desta forma, embora seja natural que as estimativas não recuperem totalmente os valores simulados, espera-se que estas projeções sejam reconstruídas adequadamente após a solução do problema inverso. Tendo em vista este aspecto, os resultados obtidos foram comparados com os valores tido como exatos. Para os testes realizados, foram consideradas seis diferentes localizações para os sensores, tal como utilizado na Seção 5.2.

São consideradas medidas simuladas de temperatura nos seis sensores, com uma frequência medida a cada 5 minutos para a solução do problema inverso. Dois tipos de modelos de evolução de estado serão levados em conta: o primeiro consiste em um modelo de evolução de estado para o fluxo de calor, utilizando uma *priori* Gaussiana, com desvio padrão 3% do valor do fluxo  $\dot{q}(y, t_i)$  no tempo  $i$  e o segundo em um modelo de evolução de estado de passeio aleatório para o fluxo de calor, onde serão avaliados alguns casos teste para o desvio padrão. A incerteza do modelo de evolução de estado foi definida apenas pelo erro de aproximação.

Na Tab.6.5 são descritos os passos utilizados para a resolução do problema inverso, tendo como base o uso do modelo reduzido pela técnica POD-RBF.

Tabela 6.5: Procedimento para estimativa da variável de estado com o uso do modelo reduzido gerado através da técnica POD-RBF.

<b>Passo 1 -</b>	Gera-se 50 instantâneos pela solução do Problema Direto (Seção 5.2.1), com um fluxo de calor com 10% de ruídos aditivos e Gaussianos;
<b>Passo 2 -</b>	Utiliza-se os instantâneos gerados no passo anterior para computar a matriz dos instantâneos e a base POD;
<b>Passo 3 -</b>	Gera-se uma nova amostra de mesma quantidade de instantâneos do Passo 1, com novos fluxos de calor com ruídos Gaussianos, para realizar o cálculo de erro de modelo pela técnica AEM;
<b>Passo 4 -</b>	O Problema Direto é utilizado para computadar as medidas simuladas utilizada pelo Problema Inverso;
<b>Passo 5 -</b>	A técnica POD-RBF é empregada como Modelo Reduzido para a realização das estimativas do Problema Inverso com a técnica de Filtro de Partícula, em particular a técnica SIR descrita na Tab.4.1.

### 6.2.1 Erro de Modelo

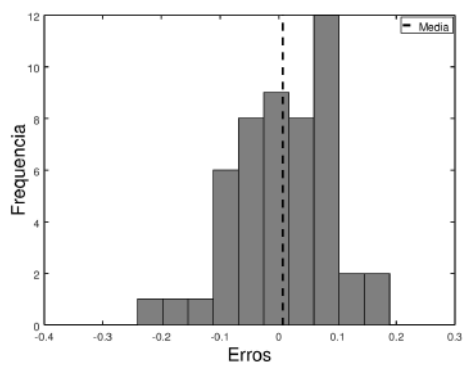
As estatísticas do erro que alimentam o AEM foram calculadas através do procedimento detalhado na Seção 4.4. Para essas estimativas serão simuladas 50 amostras, que serão relacionadas com os 50 instantâneos gerados na Seção 5.3 para o modelo reduzido. O AEM será utilizado aqui para computar as estatísticas do erro de modelo. Além disso, a avaliação dessas estatísticas servirão como base para a decisão de qual fdp será utilizada para o modelo de evolução-observação.

Já é conhecido que no caso de muitas variáveis aleatórias contínuas, não se sabe se o modelo Gaussiano é adequado ou não, e antes de tomar a decisão de usar ou não o modelo Gaussiano para resolver problemas com uma variável contínua, deve-se verificar a suposição de normalidade para os dados resultantes da observação dessa variável. Partindo do pressuposto que os dados amostrados são Gaussianos, essa hipótese será verificada aqui através dos histogramas de erro obtidos pelo AEM e pelos gráficos Q-Q plot.

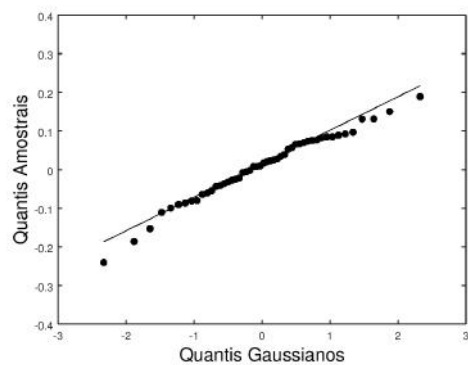
Os histogramas para a temperatura em alguns tempos e posições são apresentados a seguir. São apresentados também os gráficos Q-Q plot para os mesmos tempos e posições. Para as escolhas dos tempos observados considerou-se o instante de tempo onde o valor do fluxo é o mais elevado, um instante médio, onde o fluxo começa a decair mas ainda há incidência e o tempo final de simulação. Assim, os tempos escolhidos foram: 7, 12 e 24 horas. A escolha das posições a se analisar os gráficos levou em consideração aqueles que obtiveram ruídos maiores. Desta forma os sensores escolhidos foram: Sensor 1, Sensor 5, Sensor 6.

Observando os histogramas vê-se que o comportamento em alguns tempos não possuem a característica de sino presente nas curvas Gaussianas (Figs. 6.27(e), 6.28(a), 6.29(a)), indicando distribuições características de outra forma, tipo a ex-

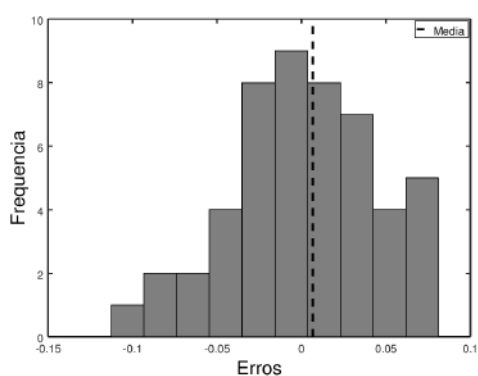
ponencial. Entretanto, ao se observar os gráficos Q-Q plot, nota-se que os dados estão bem distribuídos ao redor da reta, indicando que a suposição de normalidade pode ser utilizada. Neste contexto, levando-se em conta que a maioria dos dados obtidos apresentam um comportamento do tipo Gaussiano, a hipótese de normalidade será utilizada a fim de se poder aplicar a fdp Gaussiana nos modelos de evolução-observação.



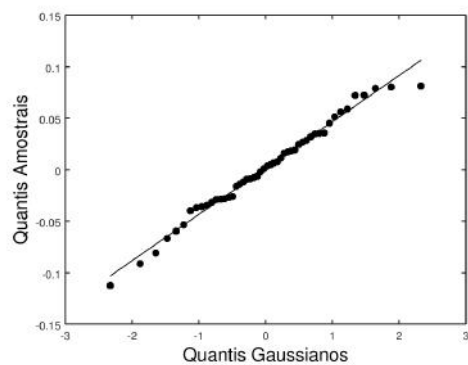
(a) Histograma,  $t=7h$



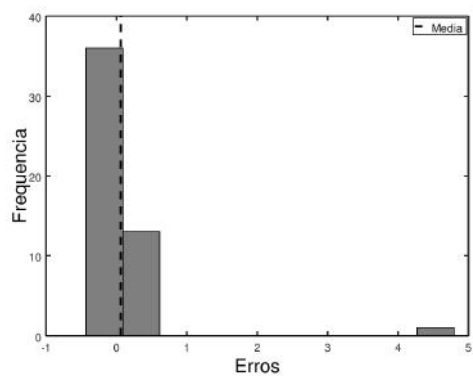
(b) Q-Q plot,  $t=7h$



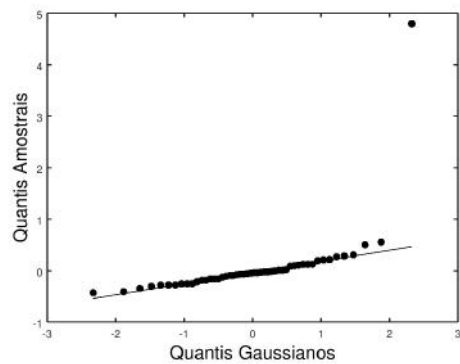
(c) Histograma,  $t=12h$



(d) Q-Q plot,  $t=12h$

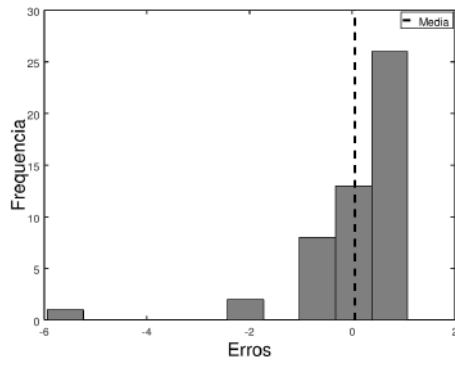


(e) Histograma,  $t=24h$

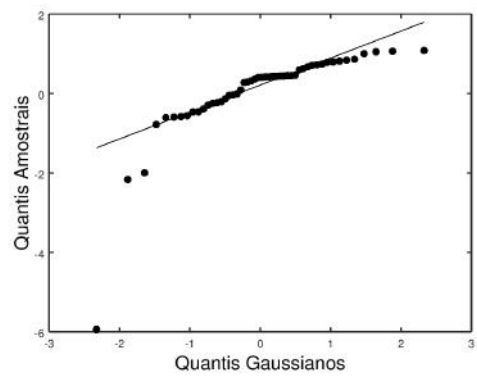


(f) Q-Q plot,  $t=24h$

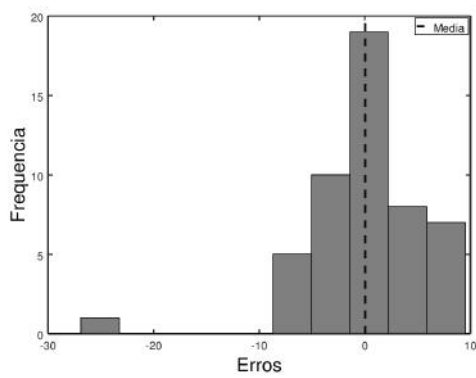
Figura 6.27: Histogramas dos erros de temperatura e gráficos Q-Q plot avaliados em  $x = 0,075m$  e  $y = 0,0m$ .



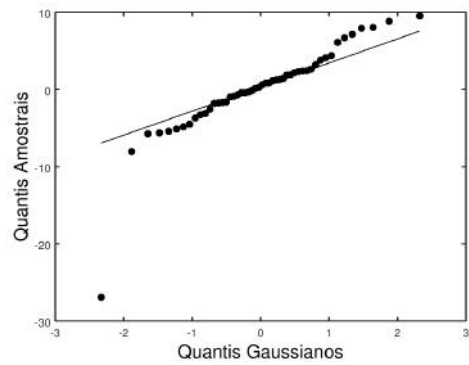
(a) Histograma,  $t=7h$



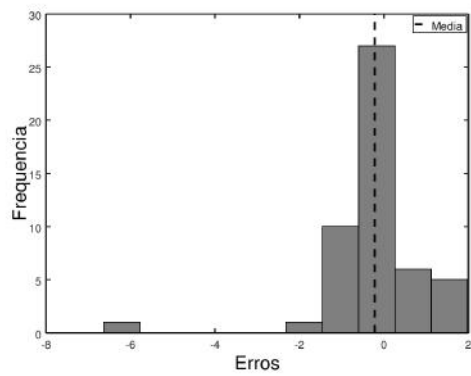
(b) Q-Q plot,  $t=7h$



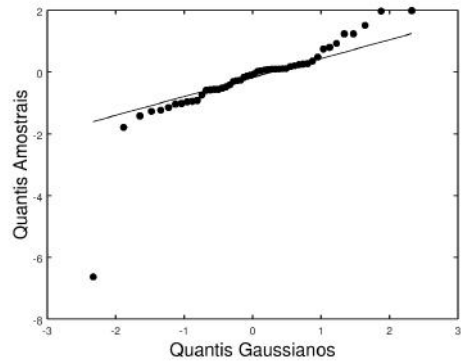
(c) Histograma,  $t=12h$



(d) Q-Q plot,  $t=12h$

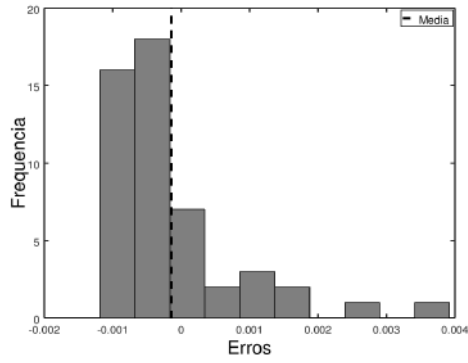


(e) Histograma,  $t=7h$

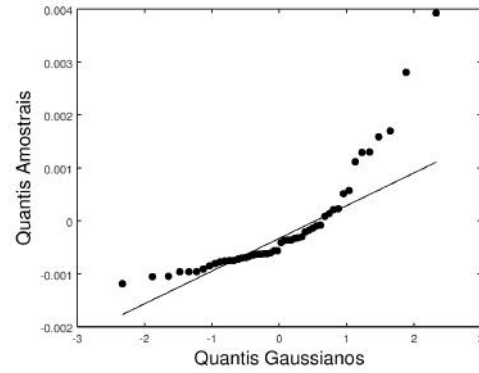


(f) Q-Q plot,  $t=24h$

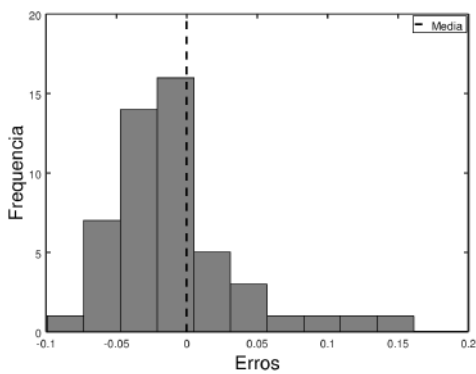
Figura 6.28: Histogramas dos erros de temperatura e gráficos Q-Q plot avaliados em  $x = 0,225m$  e  $y = 0,3m$ .



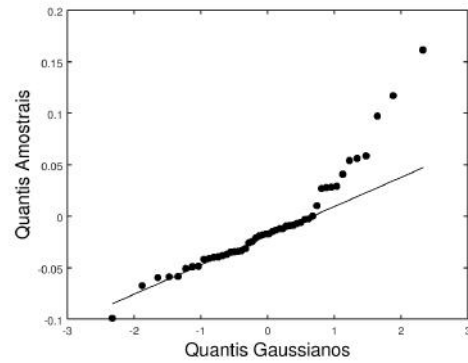
(a) Histograma,  $t=7h$



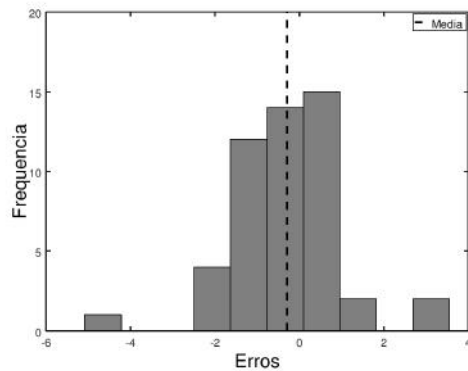
(b) Q-Q plot,  $t=7h$



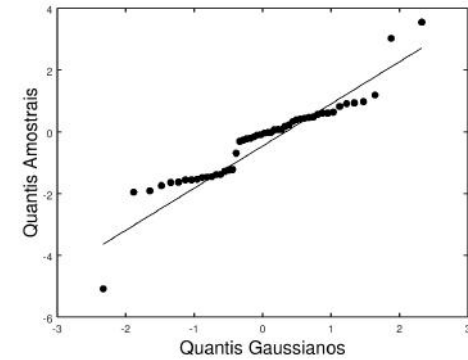
(c) Histograma,  $t=12h$



(d) Q-Q plot,  $t=12h$



(e) Histograma,  $t=7h$



(f) Q-Q plot,  $t=24h$

Figura 6.29: Histogramas dos erros e gráficos Q-Q plot avaliados em  $x = 0,075m$  e  $y = 0,3m$ .

As estatísticas obtidas foram então incorporadas na solução do problema de estimativa de estado, como descrito no Capítulo 4. Para a solução do problema de estimativa de estado o filtro SIR foi utilizado juntamente com o modelo reduzido, levando-se em conta as estatísticas do erro de aproximação e medidas simuladas.

### 6.2.2 Estimativa com Modelo de Evolução de Estado Gaussiano para o Fluxo de Calor

Esta seção tem por objetivo apresentar os resultados para a estimativa do fluxo de calor pelo filtro de partículas SIR, utilizando uma *priori* Gaussiana. O Cálculo da estimativa com *priori* Gaussiana para o fluxo de calor leva em consideração a avaliação nas seis posições descritas na Seção 5.2, sendo apresentadas as estimativas para o filtro de partículas SIR, considerando 5.000 partículas. Foi assumido que o desvio padrão das medidas de temperatura será da ordem de 1K. Conforme mencionado anteriormente, o Problema Direto tem como solução as equações descritas nas páginas 51 a 57 e tendo seus resultados apresentados no Capítulo 5. O Problema inverso será resolvido com o uso do procedimento POD-RBF com o uso do AEM. Foram também incluídas nestas mesmas figuras, as temperaturas obtidas com o modelo completo.

Observando as Figs. 6.37 a 6.42 pode-se notar que as distribuições de temperatura estimadas, considerando o modelo reduzido juntamente com o erro de aproximação, são bem próximas das produzidas pelo modelo completo, possuindo o erro máximo de 1%. Note ainda que, na posições ilustradas pelas Figs. 6.38 e 6.39 há a presença das maiores oscilações obtidas pela estimativa do problema inverso. Este fato pode ser elucidado devido ao fato que nestas posições a distribuição de temperatura ao longo de todo o tempo da simulação apresenta pouca variação de temperatura, sendo a diferença entre seus valores na ordem de 1K. Outro fato a ser observado é que a localização destes sensores a no contorno onde há a menor interferência da convecção natural.

O gráfico apresentado na Fig. 6.43 mostra a estimativa para o fluxo de calor. Observe que usando uma *priori* onde se conhece previamente o comportamento do fluxo faz com que as estimativas para o mesmo sejam bem próximas a do fluxo sem ruídos.

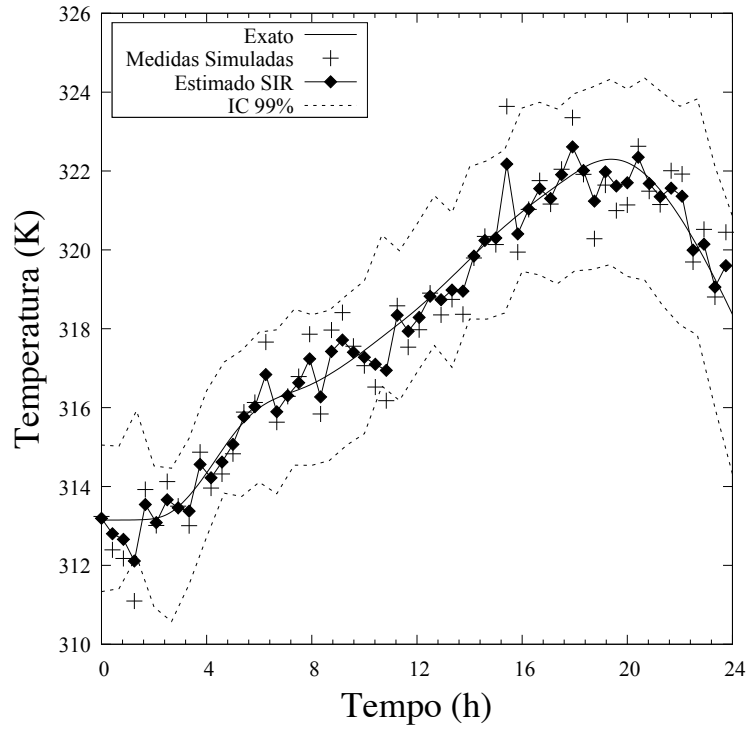


Figura 6.30: Estimativa da distribuição de temperatura, com *priori* Gaussiana, pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,075\text{m}$  e  $y = 0\text{m}$ .

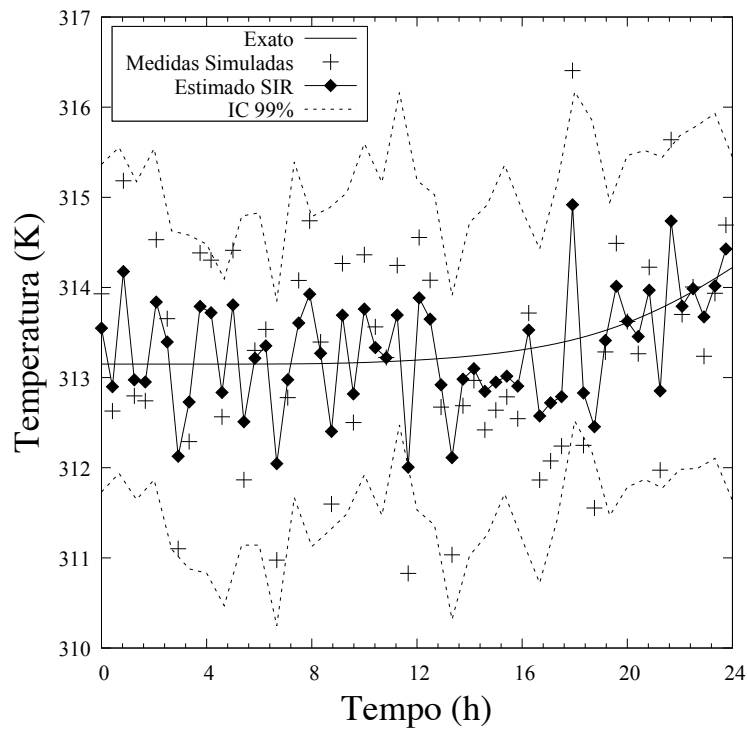


Figura 6.31: Estimativa da distribuição de temperatura, com *priori* Gaussiana, pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,225\text{m}$  e  $y = 0\text{m}$ .



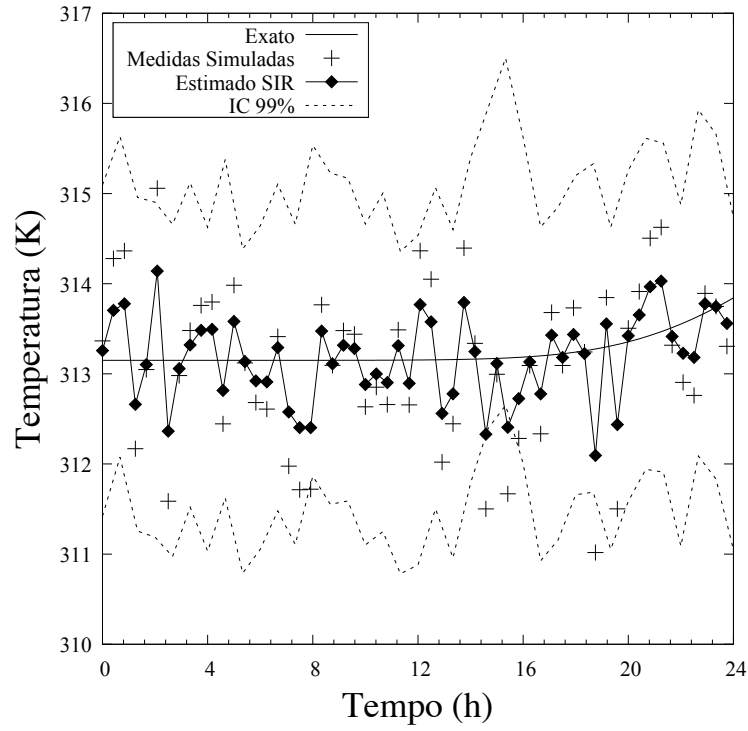


Figura 6.32: Estimativa da distribuição de temperatura, com *priori* Gaussiana, pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,3\text{m}$  e  $y = 0,075\text{m}$ .

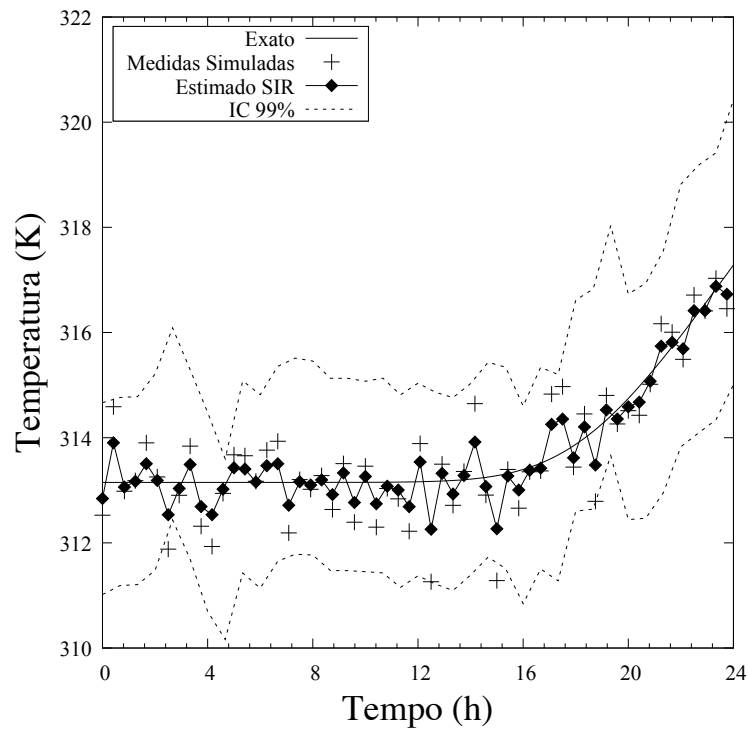


Figura 6.33: Estimativa da distribuição de temperatura, com *priori* Gaussiana, pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,3\text{m}$  e  $y = 0,225\text{m}$ .

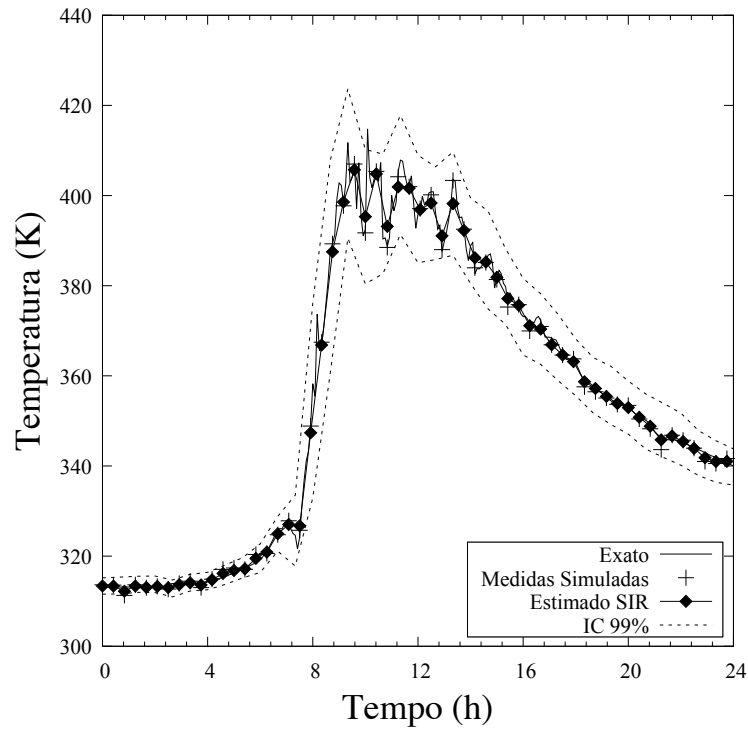


Figura 6.34: Estimativa da distribuição de temperatura, com *priori* Gaussiana, pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,225\text{m}$  e  $y = 0,3\text{m}$ .

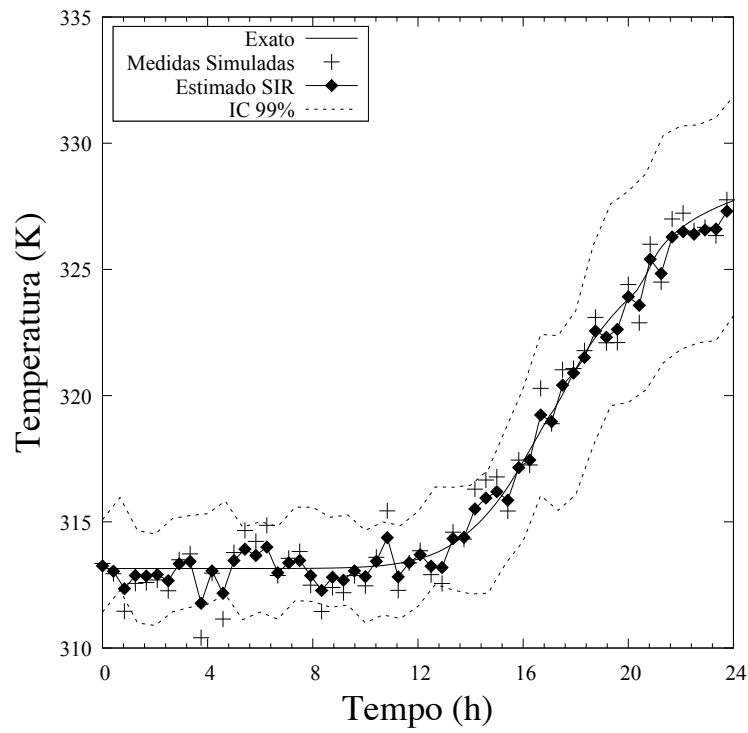


Figura 6.35: Estimativa da distribuição de temperatura, com *priori* Gaussiana, pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,075\text{m}$  e  $y = 0,3\text{m}$ .

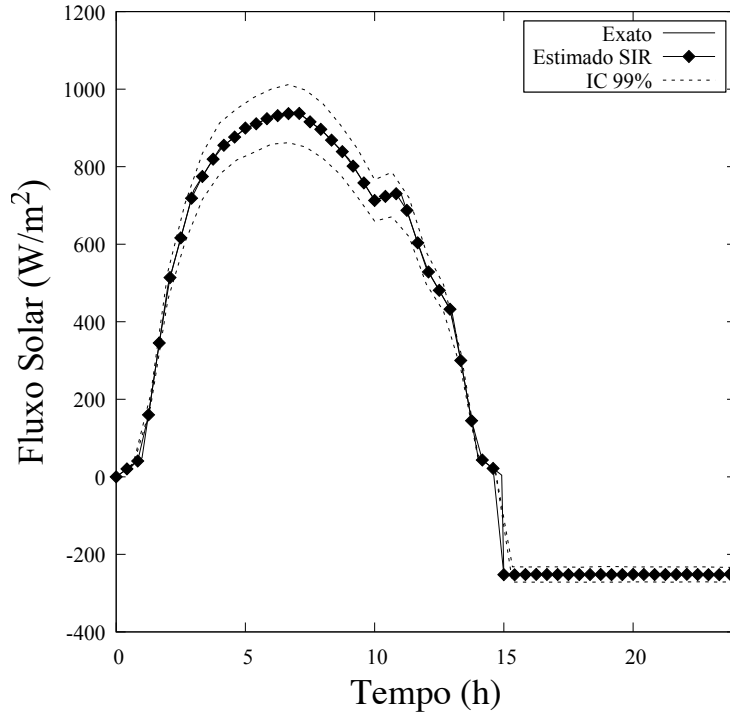


Figura 6.36: Histórico do fluxo de calor estimado pelo filtro SIR com *priori* Gaussiana.

### 6.2.3 Estimativa com um Modelo de Evolução de Estado de Passeio Aleatório para o Fluxo de Calor

Nesta seção será analisado o caso da estimativa do fluxo de calor pelo filtro de partículas SIR, utilizando um modelo de evolução de estado de passeio aleatório. Serão apresentados os resultados das estimativas nas posições dos sensores descritos nas seções anteriores e a estimativa para o fluxo de calor.

No caso analisado nesta seção também é considerada a estimativa da energia armazenada no material de mudança de fase, que é calculada como:

$$\Delta E_0 = \rho c_p \Delta V T_0 \quad (6.4a)$$

$$\Delta E_{i+1} = \Delta E_i + \left[ \frac{\dot{q}_{i+1} + \dot{q}_i}{2} \right] \cdot [t_{i+1} - t_i] \cdot \Delta V \quad (6.4b)$$

Para a estimativa com o modelo de evolução de estado de passeio aleatório foram propostos alguns casos teste, descritos na Tab 6.6.

Tabela 6.6: Casos teste para o Modelo de Evolução de Estado de passeio aleatório.

Caso	$\sigma_T$	$\sigma_{\dot{q}}$
1	1K	50W/m <sup>2</sup>
2	0,5K	50W/m <sup>2</sup>
3	1K	281,55W/m <sup>2</sup>
4	0,5K	281,55W/m <sup>2</sup>

A evolução das estimativas ao longo do tempo nos pontos selecionados para o Caso 1 é apresentada nas Figs. 6.37 a 6.42. Observe que o modelo foi capaz de recuperar bem os valores referentes as estimativas para a temperatura, com exceção daquelas apresentadas para os pontos  $(x, y) = (0, 225\text{m}, 0, 0\text{m})$ , Fig. 6.38, e  $(x, y) = (0, 3\text{m}, 0, 075\text{m})$ , Fig. 6.39, onde observam-se os maiores ruídos. Este fato pode ser justificado pela pouca variação na distribuição de temperatura apresentada para essas posições (0, 2K), fazendo com que as estimativas sofram com o ruído imposto pelas medidas simuladas (1K).

A estimativa para o fluxo de calor não capta bem a resposta para a estimativa nos instantes iniciais, porém obtém bons resultados para os tempos finais de simulação, Fig. 6.43. Pode-se notar que essa variação ocorre principalmente pelo fato de que o desvio-padrão imposto para a *priori* de passeio aleatório possui um valor baixo em comparação com toda a evolução do fluxo através do tempo. Note que o fato da estimativa não conseguir captar as respostas iniciais do fluxo afeta diretamente a estimativa para o armazenamento de energia apresentado na Fig. 6.44, no gráfico pode-se observar a energia armazenada oriunda do modelo completo, a com fluxo real pelo modelo de evolução e a estimada pelo filtro SIR. Pela Fig. 6.45 pode se observar que o erro para a previsão da energia armazenada é de no máximo 4%, o que pode se mostrar uma estimativa ruim.

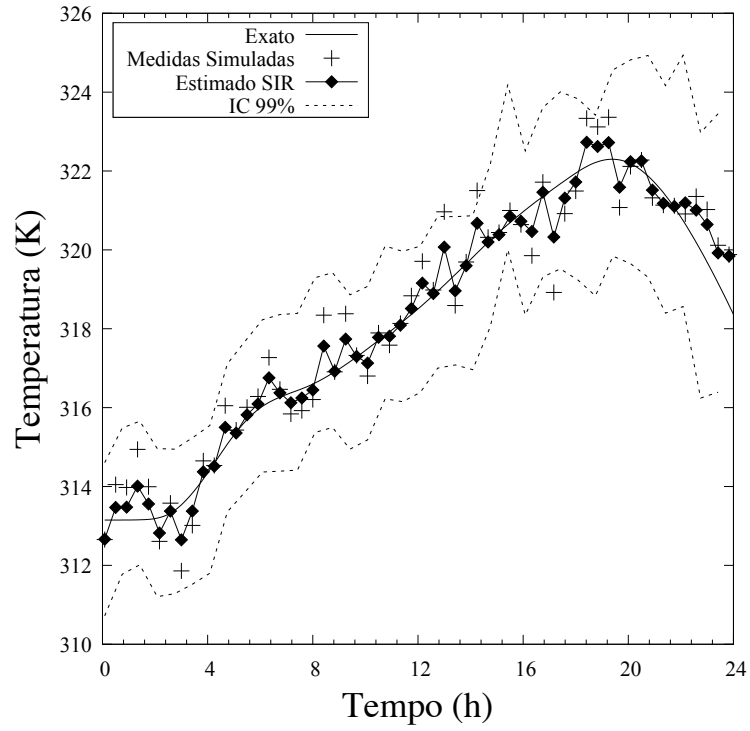


Figura 6.37: Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,075\text{m}$  e  $y = 0\text{m}$ . Caso 1.

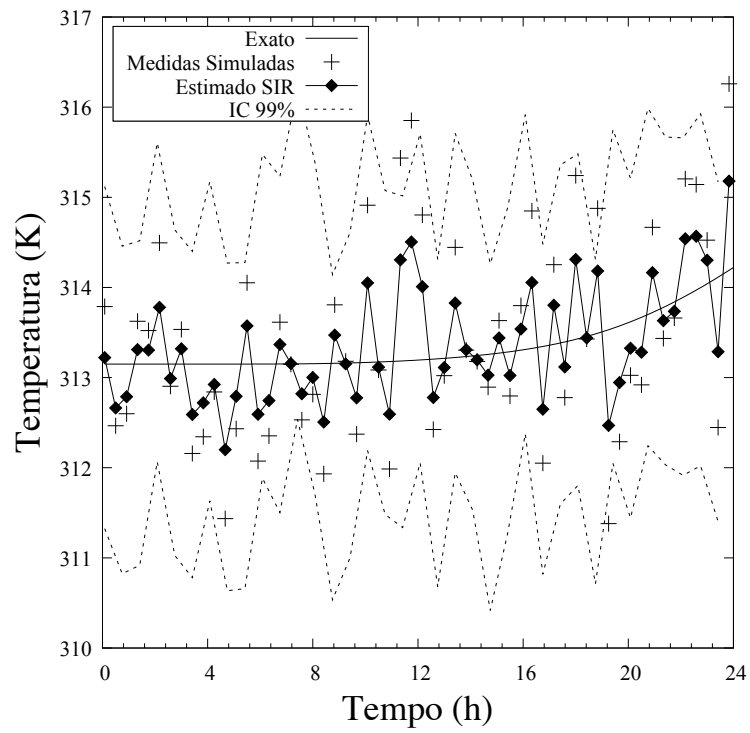


Figura 6.38: Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,225\text{m}$  e  $y = 0\text{m}$ . Caso 1.

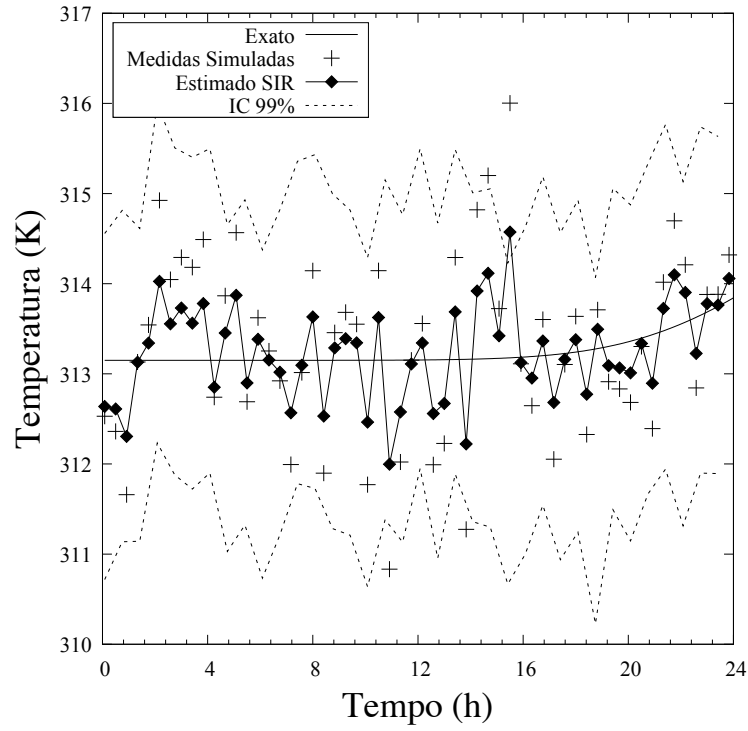


Figura 6.39: Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,3\text{m}$  e  $y = 0,075\text{m}$ . Caso 1.

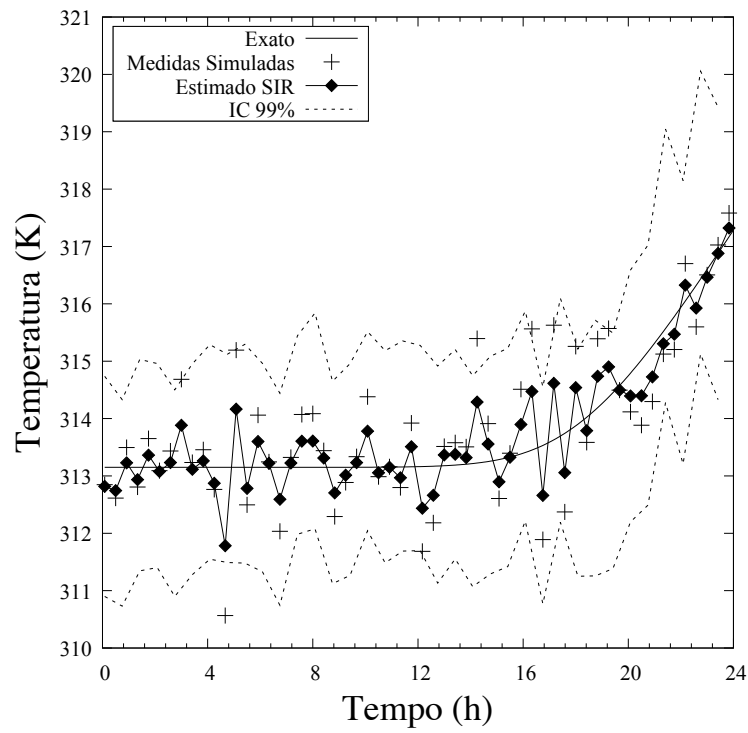


Figura 6.40: Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,3\text{m}$  e  $y = 0,225\text{m}$ . Caso 1.

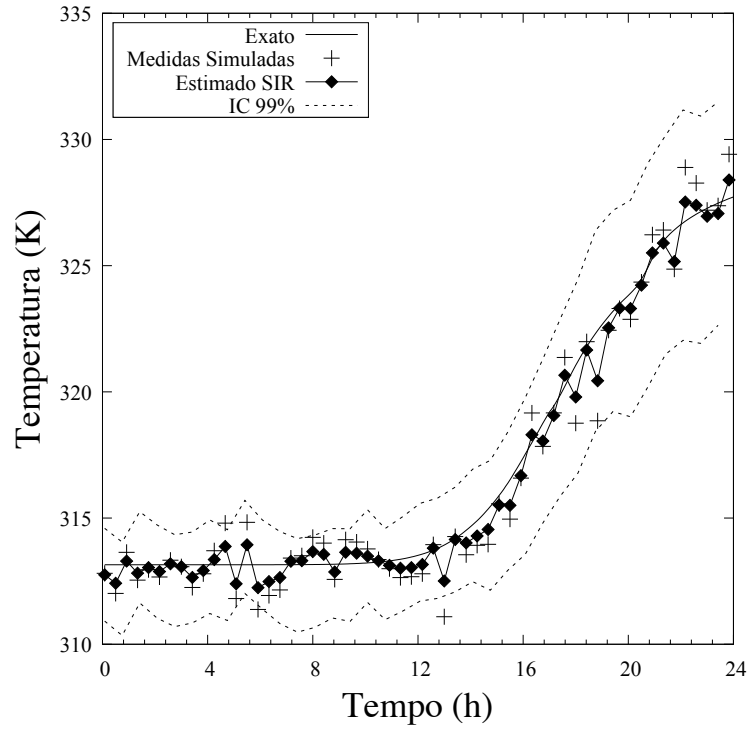


Figura 6.41: Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,225\text{m}$  e  $y = 0,3\text{m}$ . Caso 1.

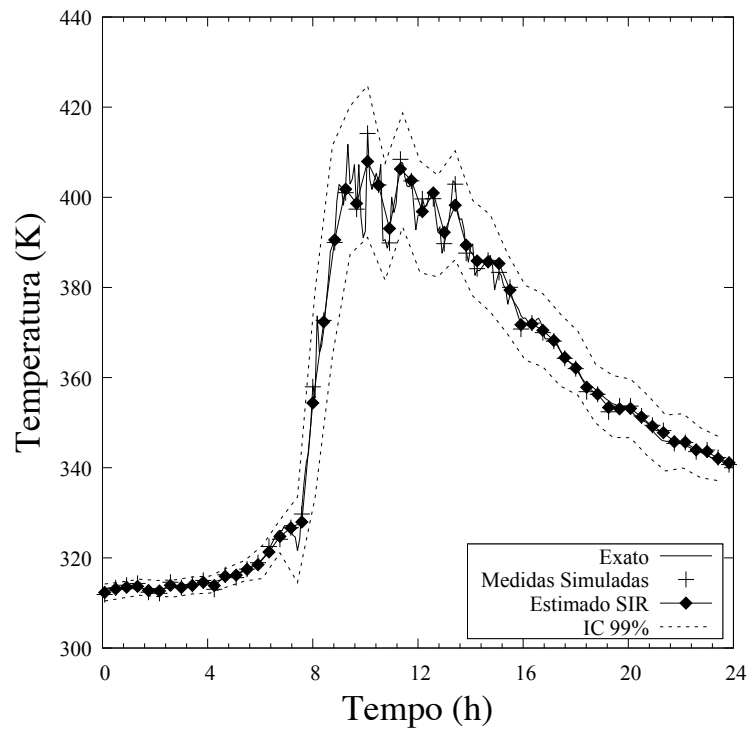


Figura 6.42: Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,075\text{m}$  e  $y = 0,3\text{m}$ . Caso 1.

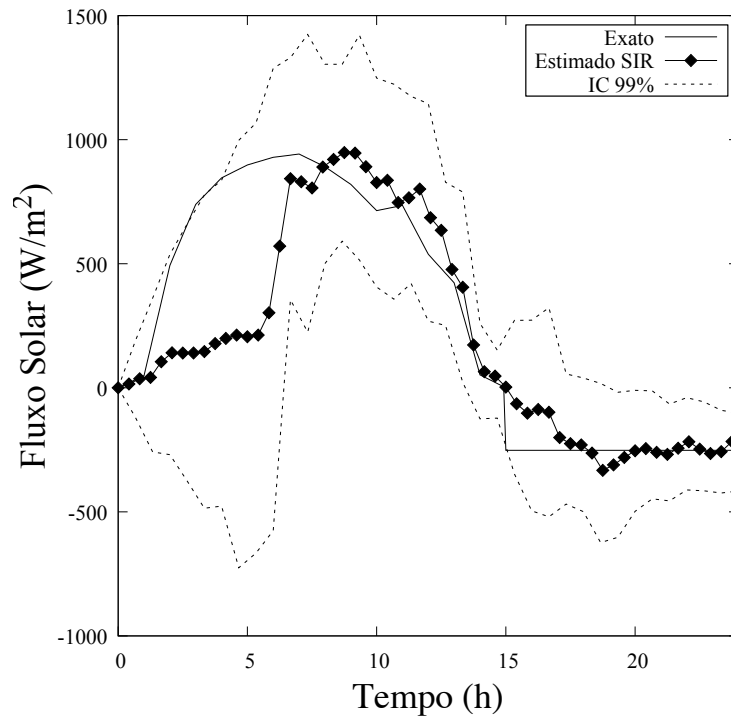


Figura 6.43: Histórico do fluxo de calor estimado pelo filtro SIR. Caso 1.

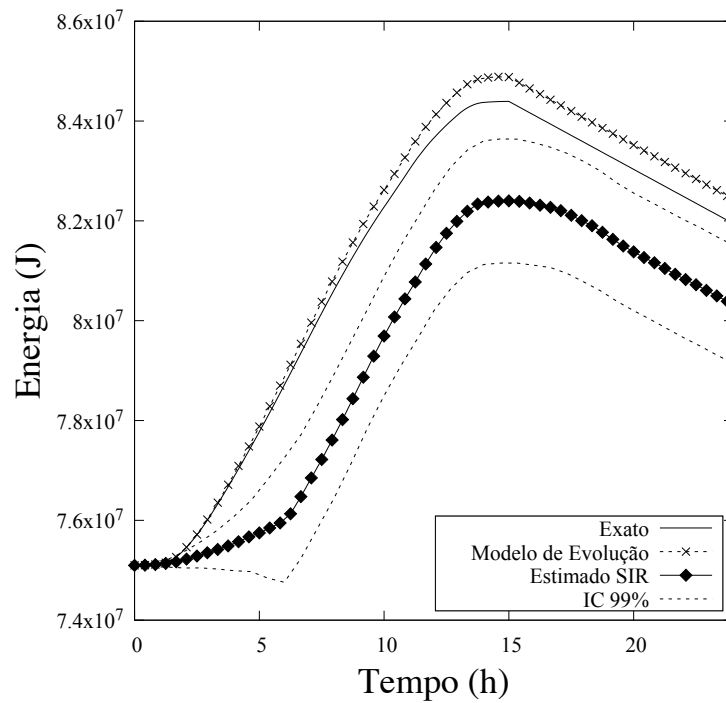


Figura 6.44: Armazenamento de energia térmica estimado pelo filtro SIR. Caso 1.



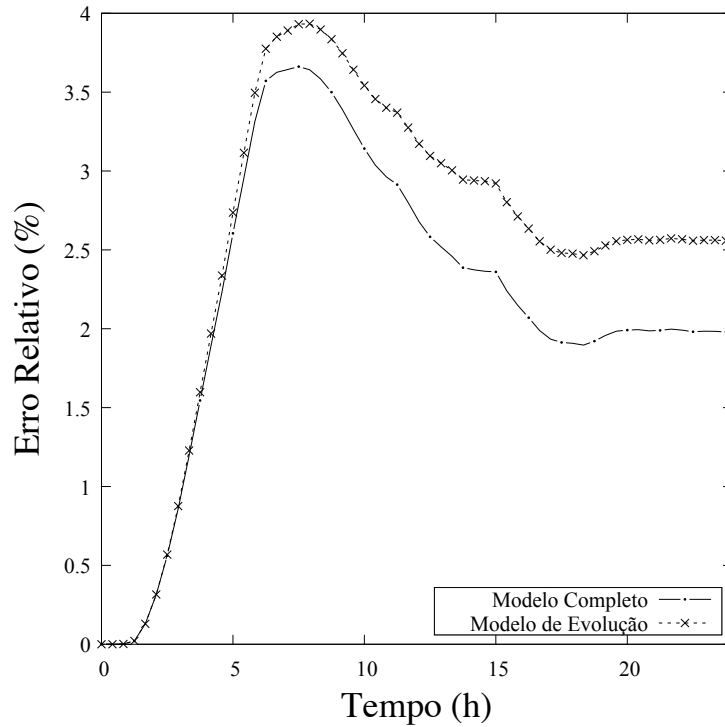


Figura 6.45: Erro relativo da comparação entre o armazenamento de energia térmica estimado pelo filtro SIR contra os modelos completos e de evolução. Caso 1.

As Figs. 6.46 a 6.51 apresentam os resultados para o caso em que as incertezas das medidas simuladas de temperatura são da ordem de  $0,5K$  e as para o fluxo de calor permanecem sendo de  $50W/m^2$ . Observa-se na Fig. 6.52 que o fato mencionado anteriormente que a diminuição nas incertezas da simulação de temperatura também diminuem as incertezas na estimativa do fluxo. Observa-se ainda que para os instantes iniciais, as estimativas ainda não conseguem captar bem a resposta para o fluxo, afetando também a estimativa do armazenamento de energia, Fig. 6.53.

Note ainda que, a estimativa do armazenamento de energia obteve resposta um tanto quanto diferente da prevista pelo modelo de observação com o fluxo real e a obtida pelo modelo completo. Porém, na Fig. 6.54 vemos a análise do desvio relativo comparando a resposta obtida pelo filtro de partículas e as obtidas, tanto para o modelo de armazenamento, quanto ao do modelo completo. Esse fato ocorre devido as aproximações do método de diferenças finitas utilizado para o modelo completo. Observe que o erro produzido pelas estimativas giram em torno de 3%, o que é uma melhora quando comparada as do Caso 1, concluindo assim que com a redução em  $0,5K$  para a medida simulada de temperatura, as estimativas apresentam uma melhora.

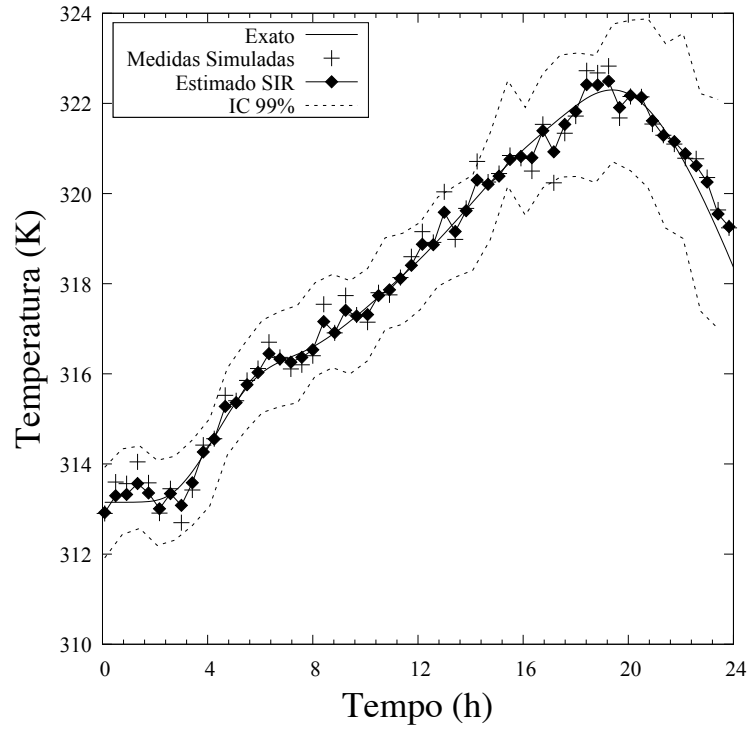


Figura 6.46: Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,075\text{m}$  e  $y = 0\text{m}$ . Caso 2.

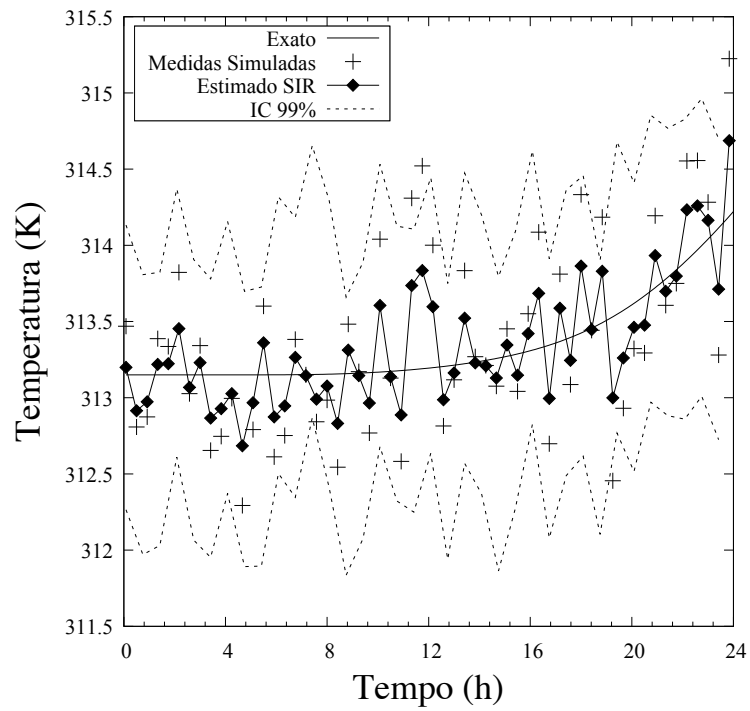


Figura 6.47: Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,225\text{m}$  e  $y = 0\text{m}$ . Caso 2.

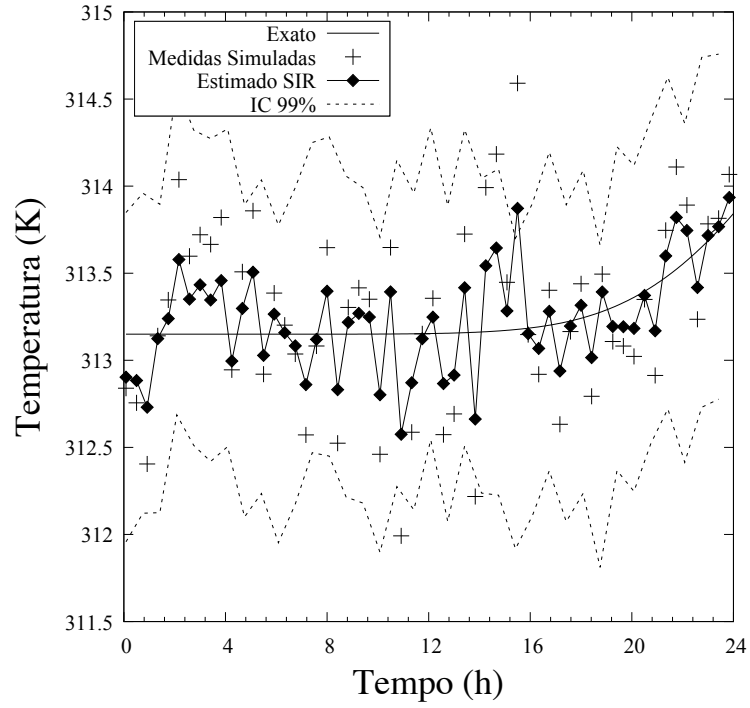


Figura 6.48: Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,3\text{m}$  e  $y = 0,075\text{m}$ . Caso 2.

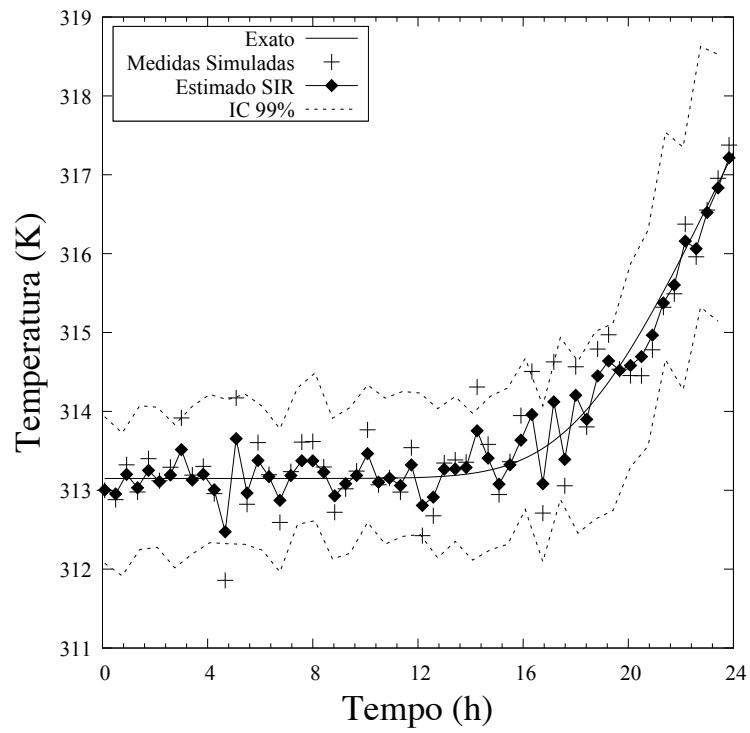


Figura 6.49: Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,3\text{m}$  e  $y = 0,225\text{m}$ . Caso 2.

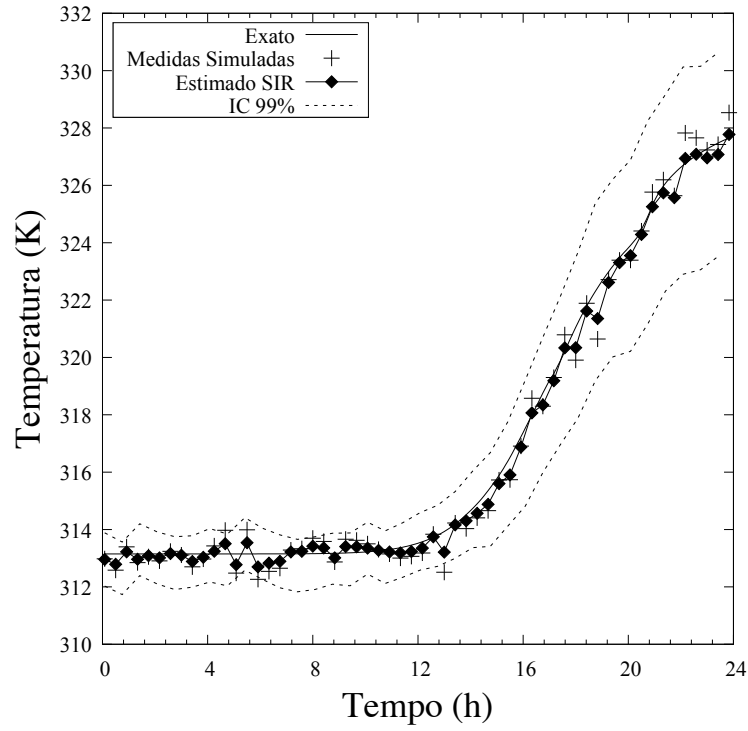


Figura 6.50: Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,225\text{m}$  e  $y = 0,3\text{m}$ . Caso 2.

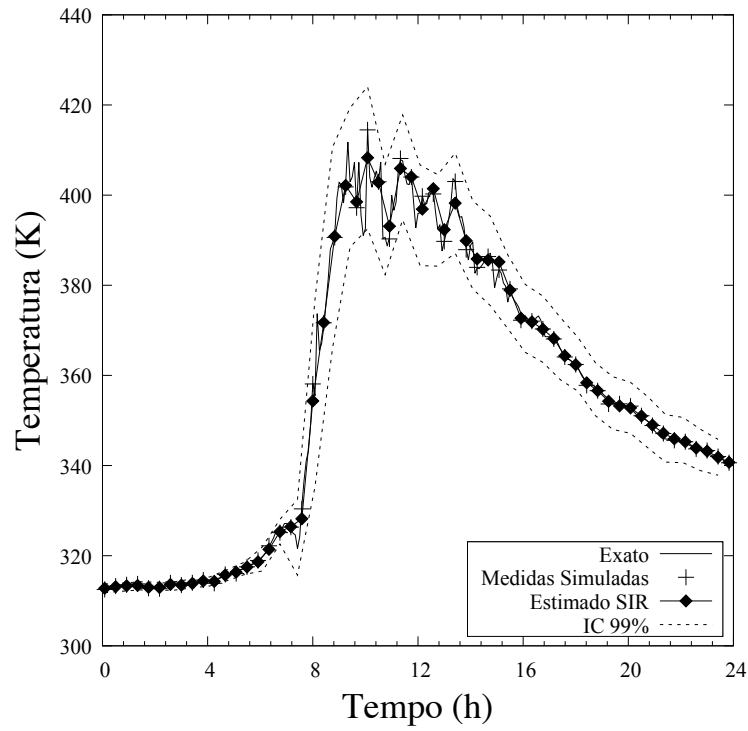


Figura 6.51: Estimativa da distribuição de temperatura do Modelo de Evolução de Estado de passeio aleatório, pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,075\text{m}$  e  $y = 0,3\text{m}$ . Caso 2.

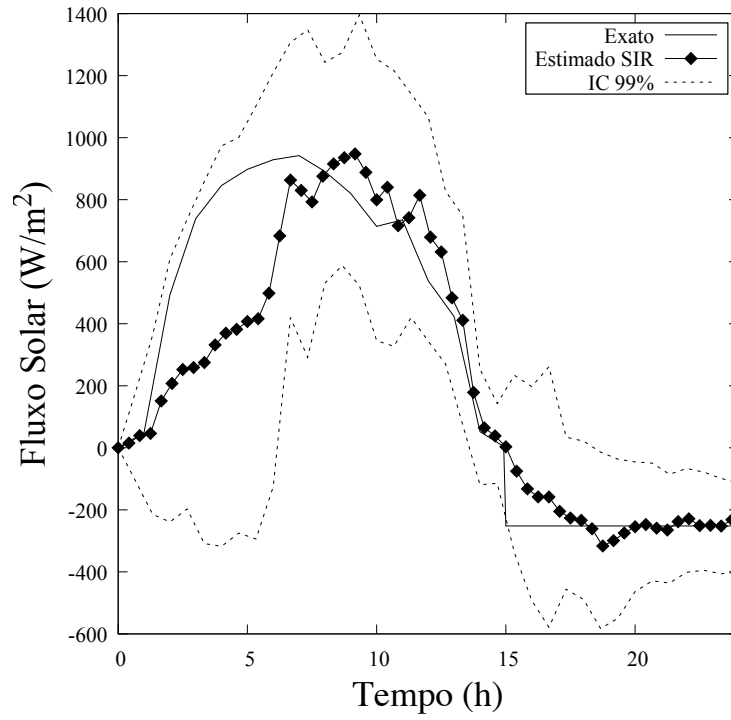


Figura 6.52: Histórico do fluxo de calor estimado pelo filtro SIR. Caso 2.

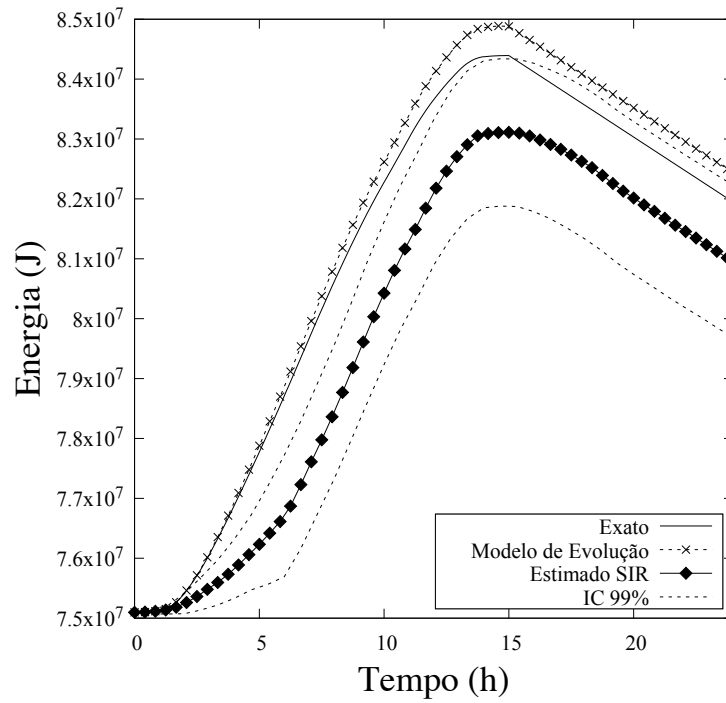


Figura 6.53: Armazenamento de energia térmica estimado pelo filtro SIR. Caso 2.

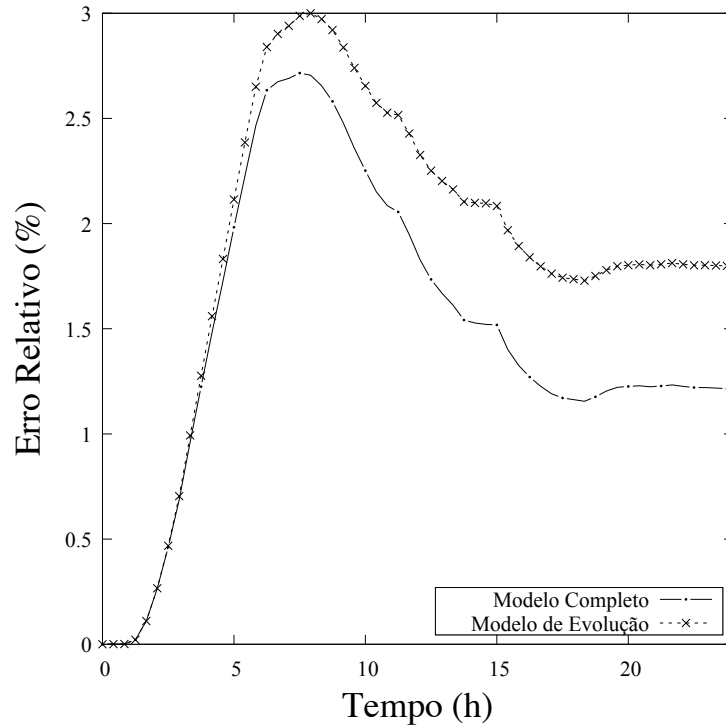


Figura 6.54: Erro relativo da comparação entre o armazenamento de energia térmica estimado pelo filtro SIR contra os modelos completos e de evolução. Caso 2.

Nas Figs. 6.55 a 6.60 são apresentados os resultados para o caso em que as incertezas das medidas simuladas de temperatura são da ordem de 1K e as para o fluxo de calor são consideradas como a média de todo o fluxo que incide durante as 24 horas, sendo este  $285,5\text{W/m}^2$ .

Observa-se na Fig. 6.61 que ao se introduzir mais incertezas para o fluxo de calor, houve uma melhora na respostas da estimativa, mesmo para o caso da medida de temperatura ser de 1K. Porém, isso acarretou em maiores incertezas na estimativa do fluxo. Note ainda que, as estimativas para a energia armazenada (Fig. 6.62) obtiveram erros de no máximo 1%, indicando uma boa melhora nos resultados (ver Fig. 6.63), e assim podendo-se mencionar a melhora das aproximações pelo modelo completo e o de evolução.

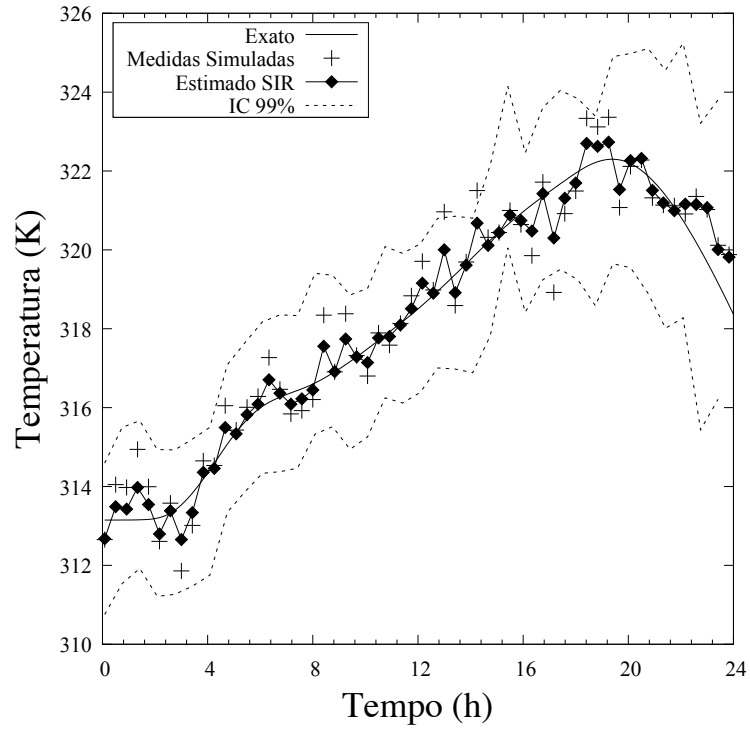


Figura 6.55: Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,075\text{m}$  e  $y = 0\text{m}$ . Caso 3.

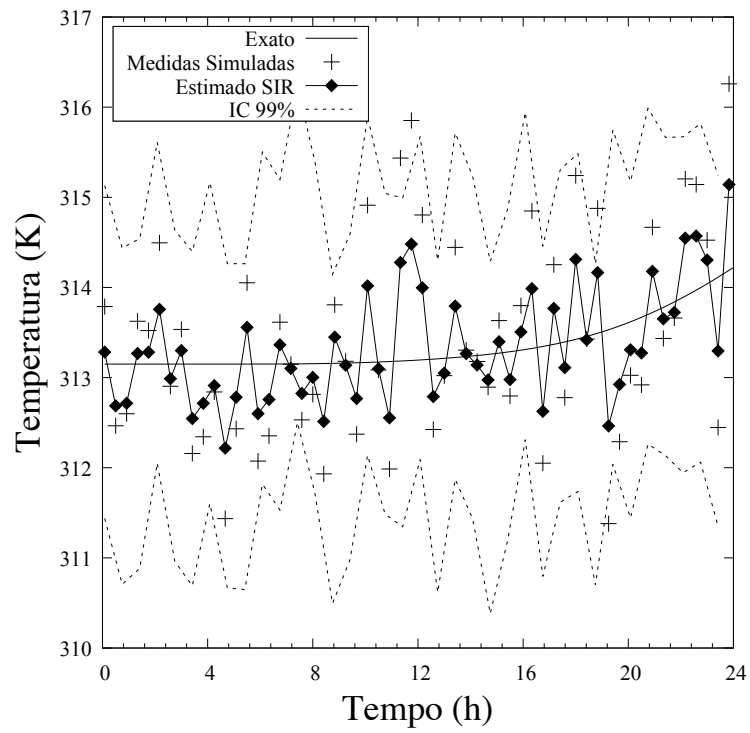


Figura 6.56: Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,225\text{m}$  e  $y = 0\text{m}$ . Caso 3.

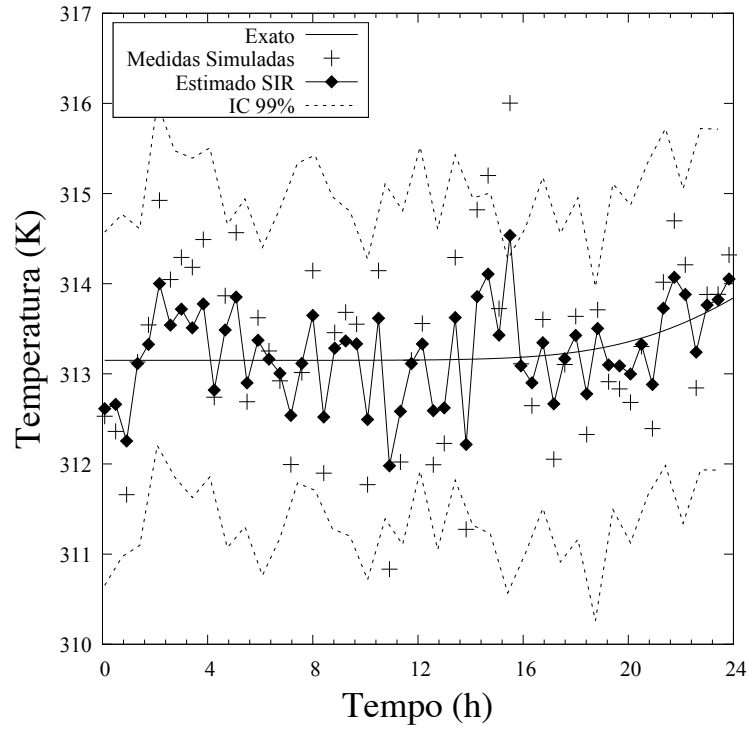


Figura 6.57: Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,3\text{m}$  e  $y = 0,075\text{m}$ . Caso 3.

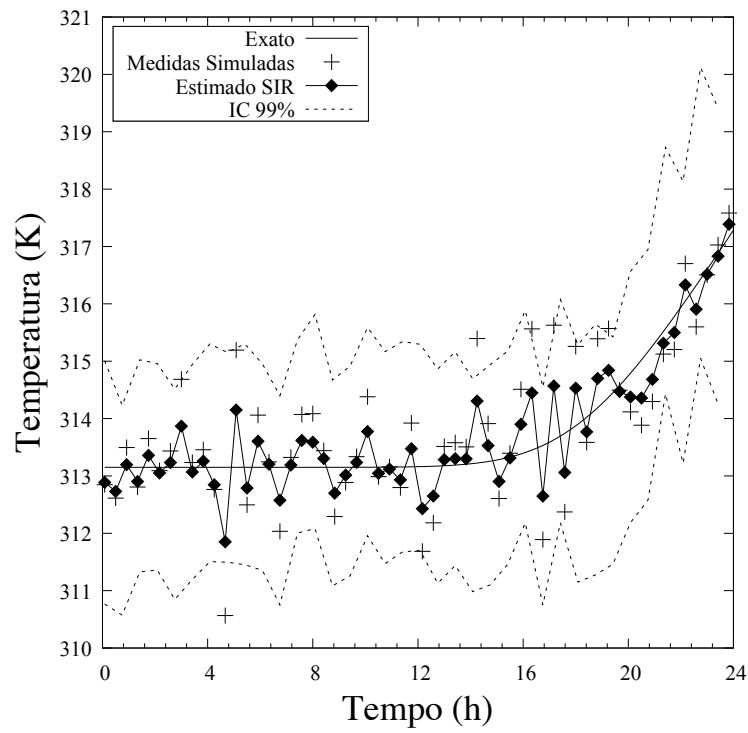


Figura 6.58: Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,3\text{m}$  e  $y = 0,225\text{m}$ . Caso 3.



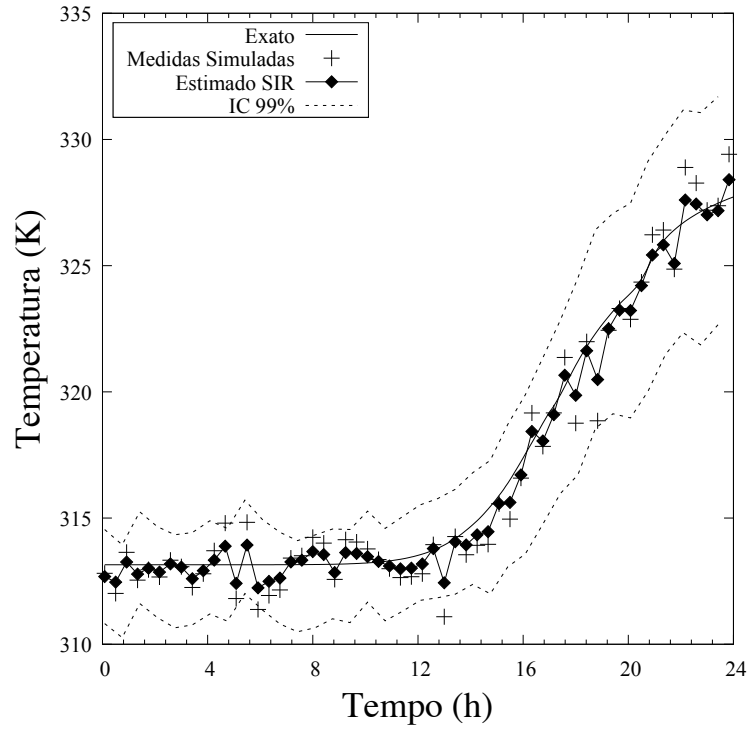


Figura 6.59: Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,225\text{m}$  e  $y = 0,3\text{m}$ . Caso 3.

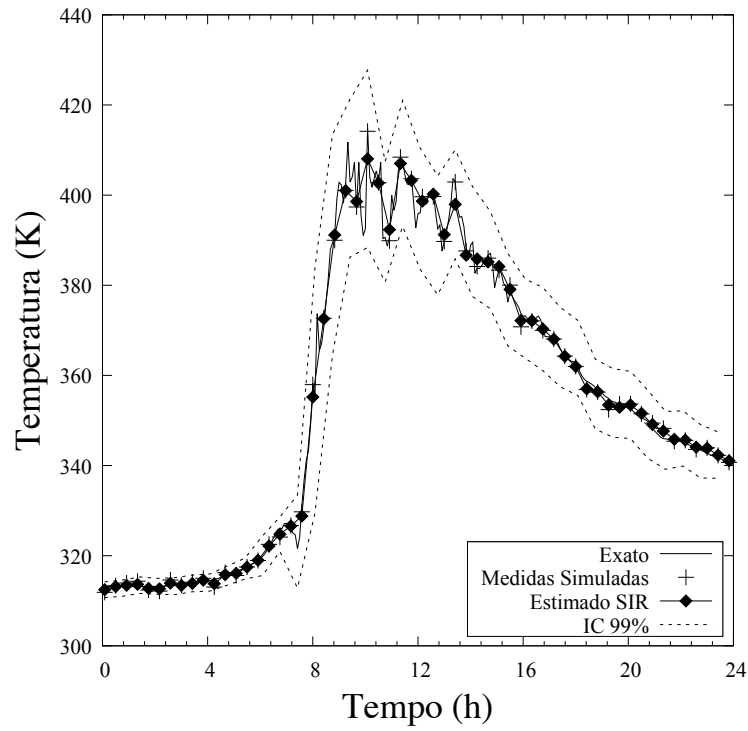


Figura 6.60: Estimativa da distribuição de temperatura do Modelo de Evolução de Estado de passeio aleatório, pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,075\text{m}$  e  $y = 0,3\text{m}$ . Caso 3.

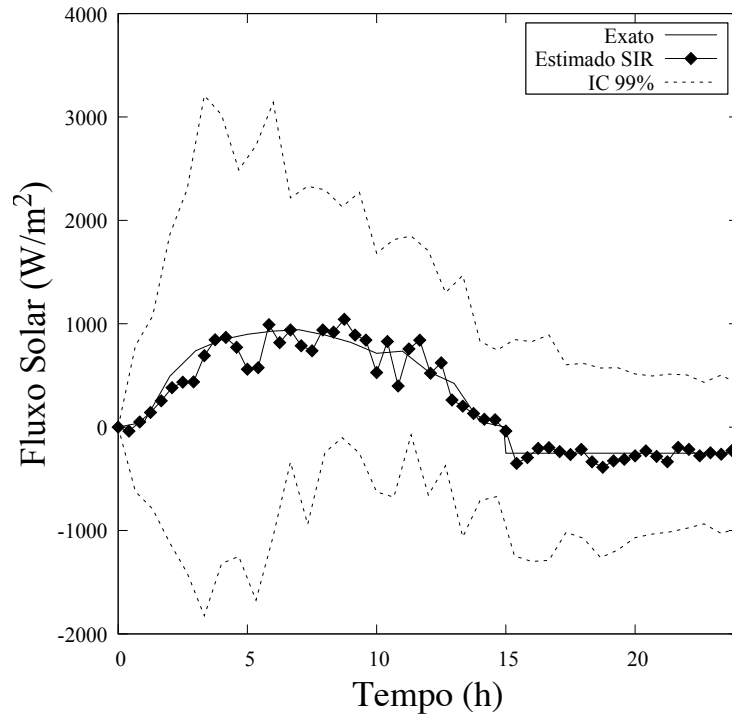


Figura 6.61: Histórico do fluxo de calor estimado pelo filtro SIR. Caso 3.

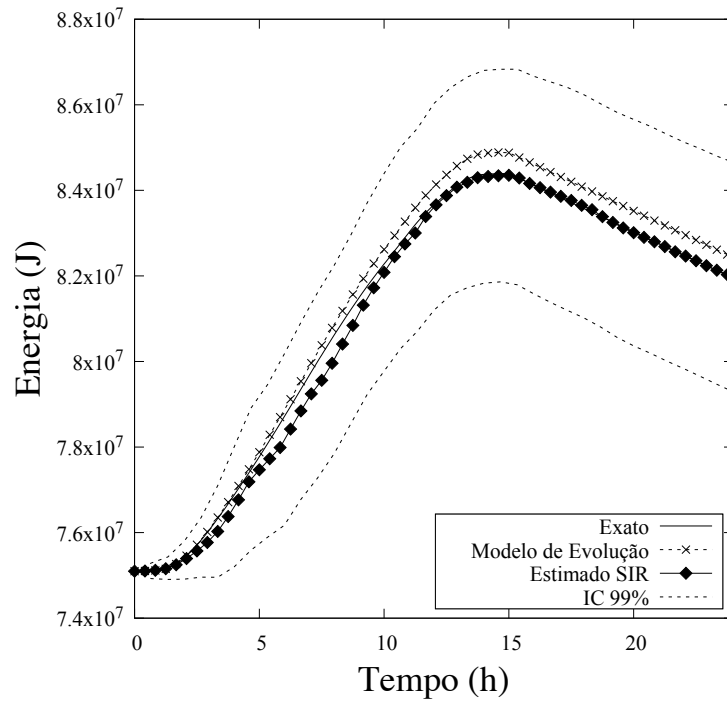


Figura 6.62: Armazenamento de energia térmica estimado pelo filtro SIR. Caso 3.

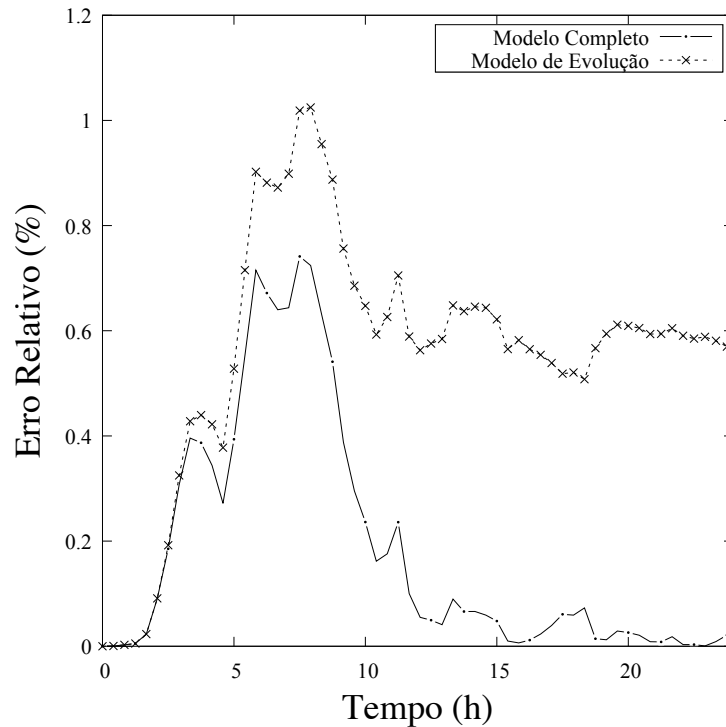


Figura 6.63: Erro relativo da comparação entre o armazenamento de energia térmica estimado pelo filtro SIR contra os modelos completos e de evolução. Caso 3.

Dado ao mencionado para o Caso 3, espera-se que com a redução do erro na medida de temperatura para 0,5K ocasione uma melhor estimativa para o Caso 4. Nas Figs. 6.64 a 6.69 são apresentados os resultados para o caso em que as incertezas das medidas simuladas de temperatura são da ordem de 0,5K e as para o fluxo de calor são consideradas como a média já mencionada de  $285,5\text{W/m}^2$ .

Observa-se na Fig. 6.70 que a combinação de maiores incertezas para o fluxo de calor e uma redução para a de medida simulada de temperatura causou uma grande incerteza na predição do fluxo. Entretanto, essa nova combinação acarretou uma melhora na estimativa de energia armazenada. Note que, as estimativas para a energia armazenada (Fig. 6.71) obtiveram erros máximos 0,5%, indicando uma boa melhora nos resultados 6.72, e assim indicando melhoras nas aproximações pelo modelo completo e de evolução.

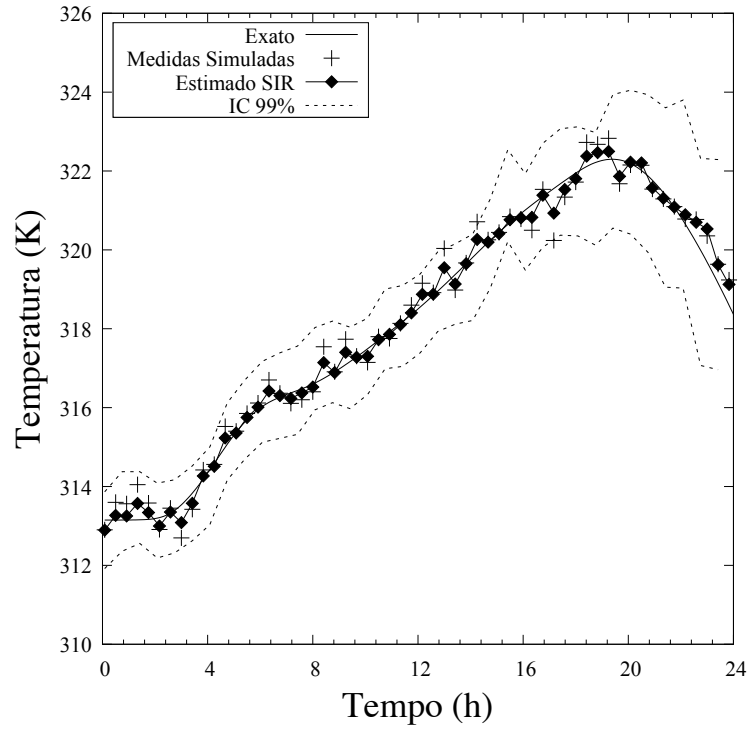


Figura 6.64: Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,075\text{m}$  e  $y = 0\text{m}$ . Caso 4.

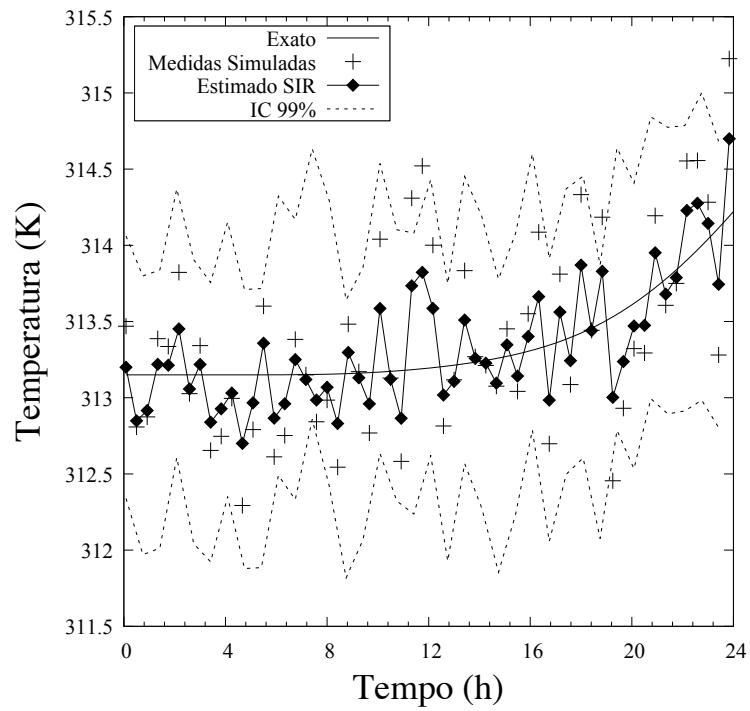


Figura 6.65: Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,225\text{m}$  e  $y = 0\text{m}$ . Caso 4.

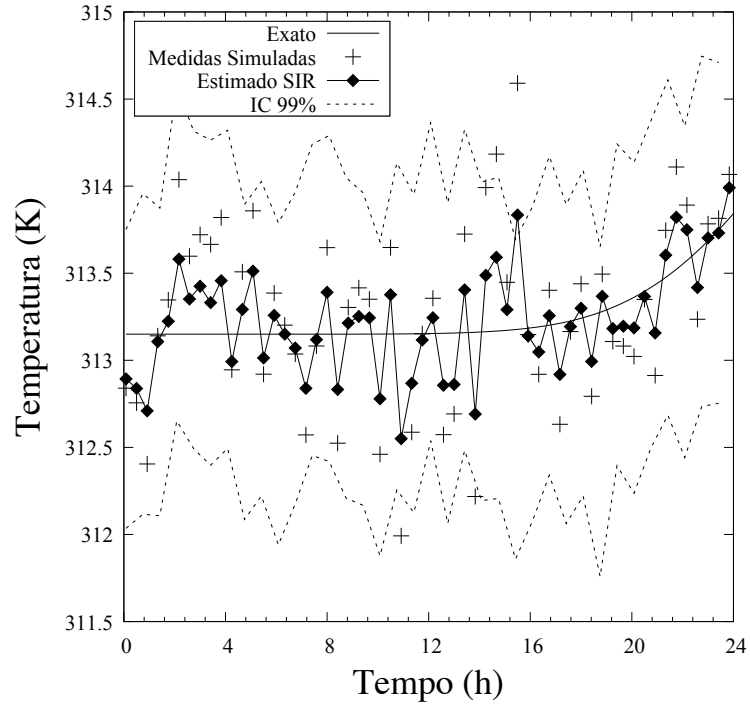


Figura 6.66: Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,3\text{m}$  e  $y = 0,075\text{m}$ . Caso 4.

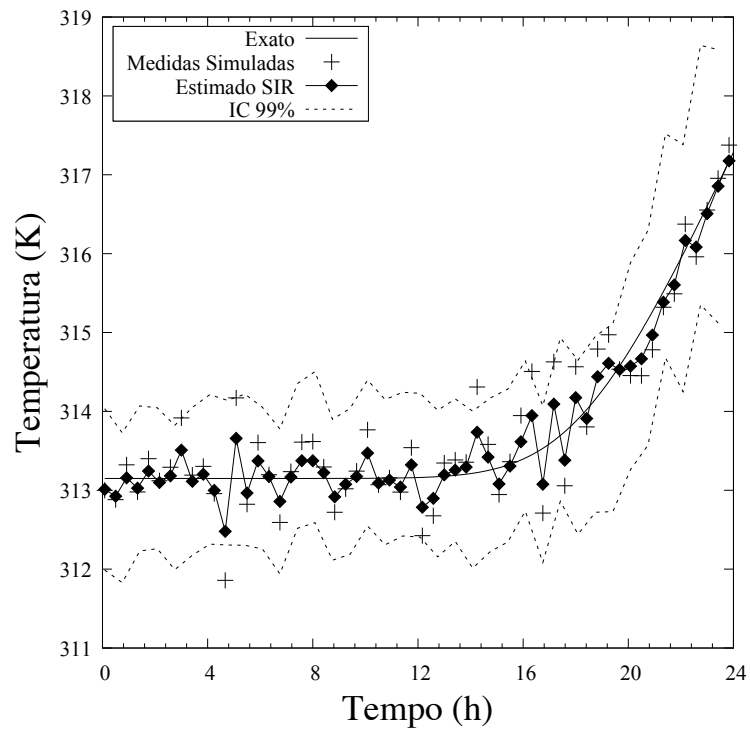


Figura 6.67: Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,3\text{m}$  e  $y = 0,225\text{m}$ . Caso 4.

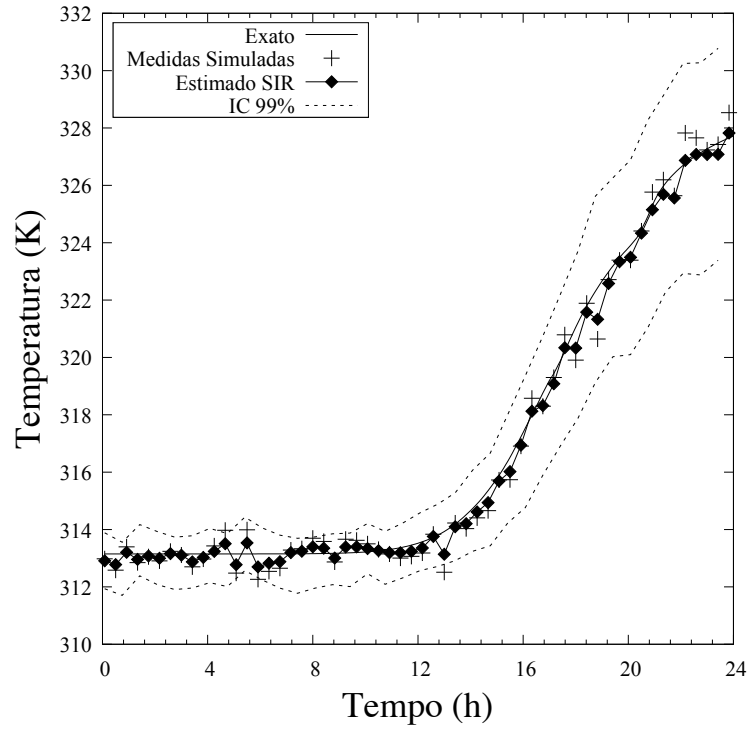


Figura 6.68: Estimativa da distribuição de temperatura pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,225\text{m}$  e  $y = 0,3\text{m}$ . Caso 4.

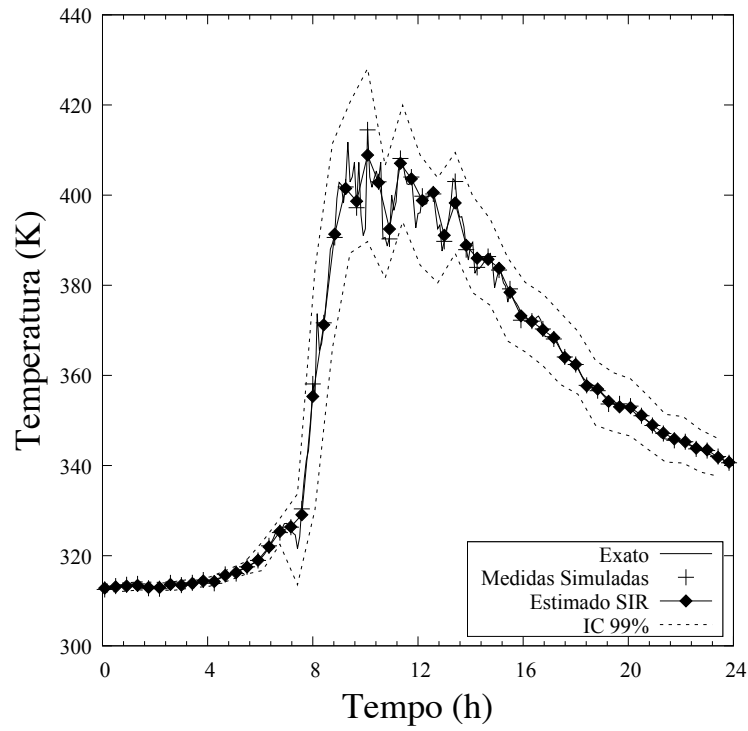


Figura 6.69: Estimativa da distribuição de temperatura do Modelo de Evolução de Estado de passeio aleatório, pelo filtro SIR no ponto  $x = 0,075\text{m}$  e  $y = 0,3\text{m}$ . Caso 4.

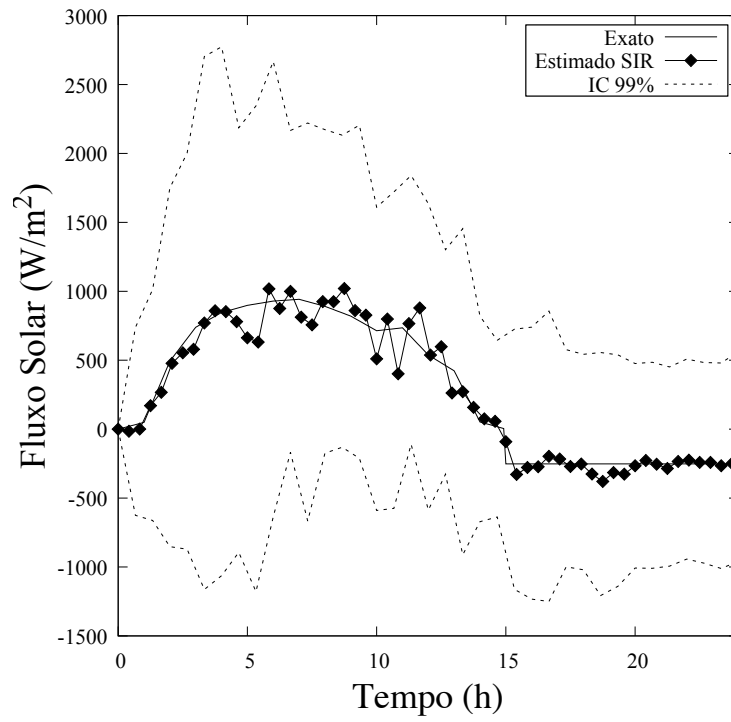


Figura 6.70: Histórico do fluxo de calor estimado pelo filtro SIR. Caso 4.

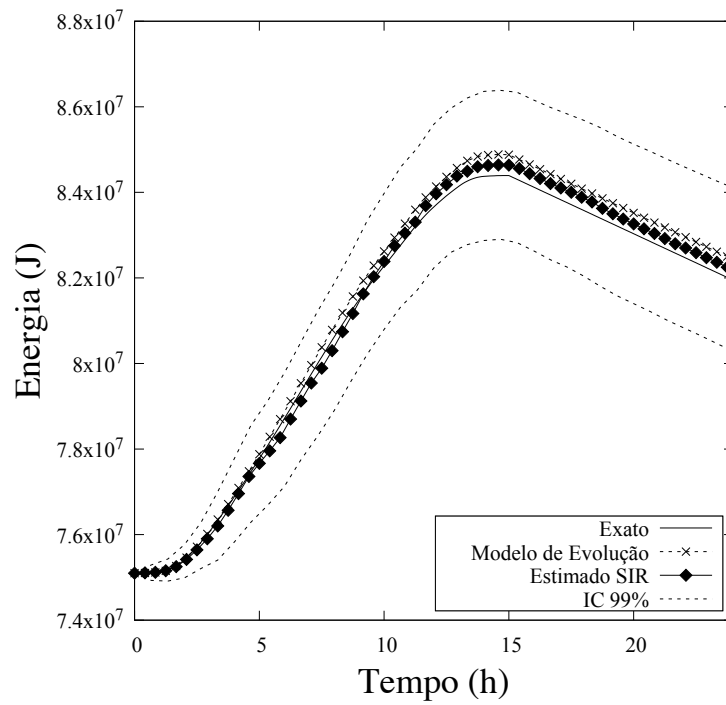


Figura 6.71: Armazenamento de energia térmica estimado pelo filtro SIR. Caso 4.

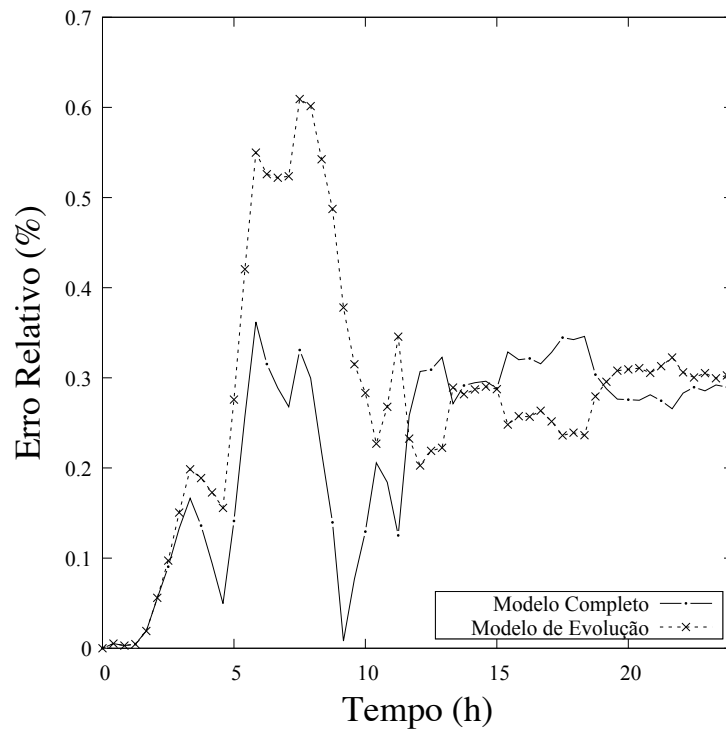


Figura 6.72: Erro relativo da comparação entre o armazenamento de energia térmica estimado pelo filtro SIR contra os modelos completos e de evolução. Caso 4.



# Capítulo 7

## Conclusões e Sugestões

Neste trabalho, as técnicas de filtro de partículas foram implementadas em problemas unidimensionais e bidimensionais para estimativas de variáveis de estado e parâmetros. O problema de estimativa de estado foi resolvido pela técnica do filtro de partículas, envolvendo modelos não lineares, com incertezas aditivas e Gaussianas, para casos com medidas transientes simuladas. O foco do trabalho foi a estimativa da energia armazenada no material de mudança de fase sob irradiância solar direta, a partir de medidas de temperatura não intrusivas.

No que concerne aos problemas unidimensionais, a implementação de filtros de partículas para a estimativa do perfil de temperatura e interface de mudança de fase e dos parâmetros do modelo, teve como premissa a aplicação em problemas de solidificação de materiais de mudança de fase. No caso bidimensional, a técnica de filtro de partículas foi implementada em um problema de armazenamento de energia térmica, estimando o fluxo de calor e consequentemente a energia armazenada no meio em estudo, envolvendo um processo de fusão e re-solidificação de um material de mudança de fase. Os modelos aqui apresentados levam em consideração a presença de nanopartículas no material de mudança de fase com o intuito de incrementar suas propriedades físicas para uma melhor eficácia no armazenamento de calor.

Os códigos computacionais desenvolvidos para o problema direto unidimensional foram verificados através da comparação entre soluções analíticas já conhecidas na literatura, contra soluções obtidas através do esquema construído com o Método dos Volumes Finitos, sendo este empregado nos esquemas explícito e implícito. No caso bidimensional as soluções foram verificadas seguindo os critérios estabelecidos de verificação descritos em ASME [13].

Para garantir que as estimativas obtidas fossem livres de crime inverso, as medidas experimentais do problema unidimensional foram simuladas através da solução do modelo direto com solução analítica no estudo do processo de solidificação enquanto que o problema inverso foi resolvido utilizando soluções numéricas. O caráter estocástico de medições de temperatura e movimento da interface de mudança de

fase foi simulado através de amostras de uma distribuição Gaussiana com média zero e desvio padrão conhecido. No caso bidimensional, as medidas foram simuladas utilizando o modelo completo, enquanto que o problema inverso foi resolvido utilizando o modelo reduzido seguindo o procedimento POD-RBF. As medições do fluxo de calor foram simuladas utilizando dois modelos de evolução de estado, um com uma *priori* Gaussiana e a outro de passeio aleatório, com média zero e desvio padrão conhecido.

Para o problema unidimensional, os resultados buscaram demonstrar o desempenho das diferentes versões dos Filtros de Partículas (SIR, ASIR e LIU & WEST). De modo geral, todas as metodologias testadas resultaram em excelentes estimativas de temperatura, concentração e movimento de interface, em comparação com os valores obtidos das soluções exatas.

As estimativas para os parâmetros através do Filtro de LIU e WEST [12] não conseguiram captar plenamente os valores exatos. Porém, os valores estimados obtiveram uma boa aproximação com os valores exatos, analisada através de desvios percentuais.

No caso bidimensional, foi implementado o filtro de partículas SIR, buscando a estimativa do fluxo de calor e assim, estimar o armazenamento de energia durante as simulações. Pode-se observar que para o Modelo de Evolução Gaussiano os resultados das estimativas para o fluxo foram plenamente captadas, enquanto que para o passeio aleatório, onde foram realizadas combinações entre casos teste, pode-se observar que para incertezas baixas no fluxo, os instantes iniciais de estimativa não são bem captados. Porém, para os instantes finais, são obtidas boas estimativas para esse fluxo. Ao contrário, quando submete-se o fluxo a incertezas altas o modelo de evolução para a energia armazenada obteve uma boa estimativa para a energia conservada, em comparação com o modelo completo, onde os erros presentes foram menores que 1%. Deve-se mencionar que apesar das boas estimativas apresentadas de energia acumulada, devido ao grande período de aquecimento inicial do material, a energia acumulada resultante ainda é baixa ao realizar o balanço entre o acumulado e o que será posto em uso.

Este trabalho buscou apresentar a utilização dos filtro de partículas para a estimativa de variáveis de estado, em particular, o armazenamento de energia, analisado pelo ponto de vista de um processo de solidificação. Pode-se concluir que as variáveis de estado de interesse foram estimadas com precisão para casos testes envolvendo incertezas nos modelos de evolução e observação, por meio de medidas com ruídos simulados e utilização de modelos reduzidos e método de erro de aproximação. Os resultados obtidos demonstraram a robustez da abordagem utilizada, que foi capaz de prever adequadamente esta variável de estado de grande interesse prático, mesmo para grandes incertezas nos modelos de evolução de estado e de observação, assim

como nas medidas experimentais.

### **7.0.1 Sugestões para trabalhos futuros**

Pode-se estender o presente estudo para casos mais realísticos. A primeira proposta consiste em alterar a condição de contorno imposta para a retirada de calor do domínio durante o período noturno, impondo uma Condição de Robin. Devido a importância que o material de mudança de fase tem no armazenamento de energia térmica, sugere-se a busca pela caracterização do material e do material nano-aprimorado, variando os percentuais e os tipos de nanopartículas presentes neste. Propõe-se a avaliação do procedimento POD-RBF utilizando diversos tipos de fluxos de irradiância solar, variando entre as estações do ano para uma melhor calibração dos resultados para predição da energia armazenada. Além disso propõe-se usar o filtro como um “observador” para controlar a energia acumulada, principalmente durante a demanda noturna, em que a energia térmica é consumida e o material de mudança de fase solidifica. Por fim, outras sugestões incluiriam a aplicação do modelo bidimensional para problemas onde as propriedades da fase sólida fossem diferentes da fase líquida e a extensão para o caso tridimensional, procurando estudar o problema de armazenamento térmico em geometrias mais realísticas.

# Referências Bibliográficas

- [1] COMPANY, B. P. *Bp Statistical Review of World Energy*. Relatório técnico, British Petroleum Company, 2017.
- [2] EBRAHIMI, A., DADVAND, A. “Simulation of melting of a nano-enhanced phase change material (NePCM) in a square cavity with two heat source-sink pairs”, *Alexandria Engineering Journal*, v. 54, pp. 1003–1017, 2015.
- [3] FERNANDES, D., PITIE, F., CACERES, G., et al. “Thermal energy storage: how previous findings determine current research priorities”, *Energy*, v. 39, pp. 246–257, 2012.
- [4] ABDIN, Z., ALIM, M. A., SAIDUR, R., et al. “Solar energy harvesting with the application of nanotechnology”, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 26, pp. 837–852, 2013.
- [5] KAIPIO, J. P., SOMERSALO, E. *Statistical and Computational Inverse Problems*. New York, Springer-Verlag, 2005.
- [6] ORLANDE, H. R. B. “Inverse Problems in Heat Transfer: New Trends on Solution Methodologies and Applications On the nonlinear theory of elasticity”. In: *14th International Heat Transfer Conference - IHTC-14*, ASME, 2014.
- [7] COLAÇO, M. J., ORLANDE, H. R. B., DULIKRAVICH, G. S. “Inverse and Optimization Problems in Heat Transfer”, *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, v. XXVIII, n. 1, 2006.
- [8] KALMAN, R. E. “A new approach to linear filtering and prediction problems”, *Journal of Basic Engineering, Transactions of the ASME*, v. 82, n. Series D, pp. 35–45, 1960.
- [9] ORLANDE, H. R. B., COLAÇO, M. J., DULIKRAVICH, G. S., et al. “State Estimation Problems in Heat Transfer”, *International Journal of Uncertainty Quantification*, v. 2, n. 3, pp. 239–258, 2012.
- [10] GREWAL, M., ANDREWS, A. *Kalman Filtering: Theory and Practice Using MATLAB*. 2 ed. , John Wiley & Sons, Inc, 2001.

- [11] CHEN, Z. “Bayesian filtering: From Kalman filters to particle filters, and beyond”, *Statistics*, v. 182, n. 1, pp. 1–69, 2003.
- [12] LIU, J., WEST, M. “Combined parameter and state estimation in simulation based filtering”. In: *Sequential Monte Carlo Methods in Practice*, pp. 197–217, New York, USA, Springer, 2001.
- [13] ASME. *Standard for Verification and Validation in Computational Fluid Dynamics and Heat Transfer: Asme V. N. v. 20*. New York, Amer Society of Mechanical, 2009.
- [14] DUFFIE, J. A., BECKMAN, W. A. *Solar Engineering of Thermal Processes*. 4 ed. New Jersey, John Wiley & Sons, 2006.
- [15] MEHLING, H., CABEZA, L. F. *Heat and Cold Storage with PCM: An Up-to-date Introduction into Basics and Applications*. Heidelberg, Berlin, Springer, 2008.
- [16] ZALBA, B., MARÍN, J. M., CABEZA, L. F., et al. “Review on thermal energy storage with phase change: materials, heat transfer analysis and applications”, *Applied Thermal Engineering*, v. 23, pp. 251–283, 2003.
- [17] ALEXIADES, V., SOLOMON, A. D. *Mathematical Modelling of Melting and Freezing Processes*. Taylor & Francis, 1993.
- [18] BEELEY, P. “Solidification 1 Crystallization and the development of cast structure”. In: *Foundry Technology*, 2 ed., cap. 2, pp. 51–99, Oxford, UK, Butterworth Heinemann, 2001.
- [19] ABHAT, A. “Low temperature latent heat thermal energy storage, Heat storage materials”, *Solar Energy*, v. 30, pp. 313–332, 1983.
- [20] SHARMA, S., SAGARA, K. “Latent Heat Storage Materials and Systems: A Review”, *International Journal of Green Energy*, v. 2, n. 1, pp. 1–56, 2005.
- [21] LANE, G. A. *Solar heat storage: Latent heat Material*, v. I. Boca Raton, FL, CRS Press, 1983.
- [22] LANE, G. A. *Solar heat storage: Latent heat Material*, v. II. Boca Raton, FL, CRS Press, 1986.

- [23] HIRANO, S., SAITOH, T., OYA, M., et al. “Long-term supercooled thermal energy storage -Thermophysical properties of disodium hydrogenphosphate 12H<sub>2</sub>O)”. In: *35th Intersociety Energy Conversion Engineering Conference and Exhibit*, v. 2, pp. 1013–1018. American Inst. Aeronaut. & Astronautics, 2000.
- [24] FERRER, G., SOLÉ, A., BARRENECHE, C., et al. “Corrosion of metal containers for use in PCM energy storage”, *Renewable Energy*, v. 76, pp. 465–469, 2015.
- [25] LÁZARO, A., ZALBA, B., BOBI, M., et al. “Experimental study on phase change materials and plastics compatibility”, *AIChE Journal*, v. 52, n. 2, pp. 804–808, 2006.
- [26] GIMENEZ-GAVARRELL, P., FERERES, S. “Glass encapsulated phase change materials for high temperature thermal energy storage”, *Renewable Energy*, v. 107, pp. 497–507, 2017.
- [27] DOLADO, P., LAZARO, A., MARIN, J. M., et al. “Characterization of melting and solidification in a real scale PCM-air heat exchanger: Numerical model and experimental validation”, *Energy Conversion and Management*, v. 52, n. 4, pp. 1890–1907, 2011.
- [28] ALVA, G., LIU, L., HUANG, X., et al. “Thermal energy storage materials and systems for solar energy applications”, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 68, pp. 693–706, feb 2017.
- [29] YOUSEF, M. F. E. H., KHODADADI, J. M. “One-dimensional Stefan problem formulation for solidification of nanostructure-enhanced phase change materials (NePCM)”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 67, pp. 202–213, 2013.
- [30] KHODADADI, J. M., HOSSEINIZADEH, S. F. “Nanoparticle-enhanced phase change materials (NEPCM) with great potential for improved thermal energy storage”, *International Communications in Heat Mass Transfer*, v. 34, pp. 534–543, 2007.
- [31] REYES, A., NEGRETE, D., MAHN, A., et al. “Design and evaluation of a heat exchanger that uses paraffin wax and recycled materials as solar energy accumulator”, *Energy Conversion and Management*, v. 88, pp. 391–398, 2014.

- [32] REYES, A., HENRÍQUEZ-VARGAS, L., ARAVENA, R., et al. “Experimental analysis, modeling and simulation of a solar energy accumulator with paraffin wax as PCM”, *Energy Conversion and Management*, v. 105, pp. 189–196, 2015.
- [33] SEBTI, S., MASTIANI, M., KASHANI, S., et al. “Numerical study of melting in an annular enclosure filled with nano-enhanced phase change material”, *Thermal Science*, v. 19, n. 3, pp. 1067–1076, 2015.
- [34] AURIEMMA, M., IAZZETTA, A. “Numerical Analysis of Melting of Paraffin Wax with Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, ZnO and CuO Nanoparticles in Rectangular Enclosure”, *Indian Journal of Science and Technology*, v. 9, n. 3, 2016.
- [35] YU, W., FRANCE, D. M., ROUTBORT, J. L., et al. “Review and Comparison of Nanofluid Thermal Conductivity and Heat Transfer Enhancements”, *Heat Transfer Engineering*, v. 29, n. 5, pp. 432–460, 2008.
- [36] DAS, S. K., CHOI, S. U. S., YU, W., et al. *Nanofluids: Science and Technology*. New York, John Wiley & Sons, 2008.
- [37] KHODADADI, J. M., FAN, L., BABAEI, H. “Thermal conductivity enhancement of nanostructure-based colloidal suspensions utilize das phase change materials for thermal energy storage: A review”, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 24, pp. 418–444, 2013.
- [38] ZENG, Y., FAN, L. W., XIAO, Y. Q., et al. “An experimental investigation of melting of nanoparticle-enhanced phase change materials (NePCMs) in a bottom-heated vertical cylindrical cavity”, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 66, pp. 111–117, 2013.
- [39] FAN, L., KHODADADI, J. M. “A theoretical and experimental investigation of unidirectional freezing of nanoparticle-enhanced phase change materials”, *Journal of Heat Transfer, Transactions of the ASME*, v. 134, n. 092301, 2012.
- [40] KUMARESAN, V., VELRAJ, R., DAS, S. K. “The effect of carbon nanotubes in enhancing the thermal transport properties of PCM during solidification”, *Heat Mass Transfer*, v. 48, pp. 1345–1355, 2012.
- [41] FAN, L., KHODADADI, J. M. “An experimental investigation of enhanced thermal conductivity and expedited unidirectional freezing of cyclohexane-based nanoparticle suspensions utilized as nano-enhanced phase change materials NePCM”, *International Journal of Thermal Sciences*, v. 62, pp. 120–126, 2012.

- [42] AL-KAYIEM, H., LIN, S., LUKMON, A. “Review on Nanomaterials for Thermal Energy Storage Technologies”, *Nanoscience & Nanotechnology-Asia*, v. 3, n. 1, pp. 60–71, 2013.
- [43] RAAM DHEEP, G., SREEKUMAR, A. “Influence of nanomaterials on properties of latent heat solar thermal energy storage materials – A review”, *Energy Conversion and Management*, v. 83, pp. 133–148, 2014.
- [44] KIBRIA, M., ANISUR, M., MAHFUZ, M., et al. “A review on thermophysical properties of nanoparticle dispersed phase change materials”, *Energy Conversion and Management*, v. 95, pp. 69–89, 2015.
- [45] SHUKLA, A., KANT, K., SHARMA, A. “Solar still with latent heat energy storage: A review”, *Innovative Food Science & Emerging Technologies*, v. 41, pp. 34–46, 2017.
- [46] ZHU, D., WU, S., YANG, S. “Numerical simulation on thermal energy storage behavior of SiC-H<sub>2</sub>O nanofluids”, *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, Environ*, v. 33, pp. 1317–1325, 2011.
- [47] KASHANI, S., RANJBAR, A. A., ABDOLLAHZADEH, M., et al. “Solidification of nanoenhanced phase change material (NEPCM) in a wavy cavity”, *Heat Mass Transfer*, v. 48, pp. 1155–1166, 2012.
- [48] HOSSEINIZADEH, S., DARZI, A. R., TAN, F. “Numerical investigations of unconstrained melting of nano-enhanced phase change material (NEPCM) inside a spherical container”, *International Journal of Thermal Sciences*, v. 41, pp. 77–83, 2012.
- [49] SCIACOVELLI, A., COLELLA, F., VERDA, V. “Melting of PCM in a thermal energy storage unit: numerical investigation and effect of nanoparticle enhancement”, *International Journal of Energy Research*, v. 37, pp. 1610–1623, 2012.
- [50] HO, C., GAO, J. “Preparation and thermophysical properties of nanoparticle-in-paraffin emulsion as phase change material”, *International Communications in Heat and Mass Transfer*, v. 36, pp. 467–470, 2009.
- [51] RANJBAR, A., KASHANI, S., HOSSEINIZADEH, S., et al. “Numerical heat transfer studies of a latent heat storage system containing nano-enhanced phase change material”, *Thermal Science*, v. 15, n. 1, pp. 169–181, 2011.



- [52] WU, S., ZHU, D., ZHANG, X., et al. “Preparation and Melting/Freezing Characteristics of Cu/Paraffin Nanofluid as Phase-Change Material (PCM)”, *Energy & Fuels*, v. 24, n. 3, pp. 1894–1898, 2010.
- [53] BOSE, P., AMIRTHAM, V. A. “A review on thermal conductivity enhancement of paraffinwax as latent heat energy storage material”, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 65, pp. 81–100, 2016.
- [54] LIN, S. C., AL-KAYIEM, H. H. “Thermophysical Properties of Nanoparticles-Phase Change Material Compositions for Thermal Energy Storage”, *Applied Mechanics and Materials*, v. 232, pp. 127–131, nov 2012.
- [55] DHAIDAN, N. S., KHODADADI, J. M., HATTAB, T. A. A., et al. “Experimental and numerical investigation of melting of phase change material/nanoparticle suspensions in a square container subjected to a constant heat flux”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 66, pp. 672–683, 2013.
- [56] ŞAHAN, N., FOIS, M., PAKSOY, H. “Improving thermal conductivity phase change materials - A study of paraffin nanomagnetite composites”, *Solar Energy Materials and Solar Cells*, v. 137, pp. 61–67, 2015.
- [57] LIN, S. C., AL-KAYIEM, H. H. “Evaluation of copper nanoparticles – Paraffin wax compositions for solar thermal energy storage”, *Solar Energy*, v. 132, pp. 267–278, 2016.
- [58] HU, H., ARGYROPOULOS, S. A. “Mathematical modelling of solidification and melting: A review”, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, v. 4, n. 4, pp. 371–396, 1996.
- [59] JAFARI, H., GOLBABAI, A., SALEHPOOR, E., et al. “Application of Variational Iteration Method for Stefan Problem”, *Applied Mathematical Sciences*, v. 2, n. 60, pp. 3001–3004, 2008.
- [60] MITCHELL, S. L., MYERS, T. G. “Application of standard and refined heat balance integral methods to one-dimensional Stefan problems”, *Society for Industrial and Applied Mathematics*, v. 52, n. 1, pp. 57–86, 2010.
- [61] MENNIG, J., ÖZİŞİK, M. N. “Coupled Integral Equation Approach for Solving Melting or Solidification”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 28, n. 8, pp. 1481–1485, 1985.

- [62] YAN, M. M., HUANG, P. S. “Perturbation Solutions to Phase Change Problem Subject to Convection and Radiation”, *Journal of Heat Transfer, Transactions of the ASME*, v. 101, n. 1, pp. 96–100, 1979.
- [63] ZHAOCHUN, W., JIANPING, L., JINGMEI, F. “A novel algorithm for solving the classical Stefan problem”, *Thermal Science*, v. 44, n. 1, pp. 39–44, 2011.
- [64] PHAM, Q. T. “A fast, unconditionally stable finite-difference scheme for heat conduction with phase change”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 28, pp. 2079–2084, 1985.
- [65] VOLLER, V. R., CROSS, M. “Accurate solutions of moving boundary problems using the enthalpy method”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 24, pp. 545–556, 1981.
- [66] VOLLER, V. R., BRENT, A. D., PRAKASH, C. “The modeling of heat mass and solute transport in solidification systems”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 32, pp. 1719–1731, 1989.
- [67] FONT, F., MITCHELL, S. L., MYERS, T. G. “One-dimensional solidification of supercooled melts”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 62, pp. 411–421, 2013.
- [68] ÖZİŞİK, M. N. *Heat conduction*. 2 ed. Nova York, John Wiley & Sons, 1993.
- [69] ÖZİŞİK, M. N. *Finite Difference Methods in Heat Transfer*. CRC Press, 1994.
- [70] VOLLER, V. R. “Implicit finite-difference solutions of the enthalpy formulation of stefan problems”, *IMA Journal of Numerical Analysis*, v. 5, pp. 201–214, 1985.
- [71] COLAÇO, M. J., DULIKRAVICH, G. S. “Solidification of Double-Diffusive Flows Using Thermo-Magneto-Hydrodynamics and Optimization”, *Materials and Manufacturing Processes*, v. 22, pp. 594–606, 2007.
- [72] VOLLER, V. R. “A numerical method for the Rubinstein binary-alloy problem in the presence of an under-cooled liquid”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 51, pp. 696–706, 2008.
- [73] CROWLEY, A. B., OCKENDON, J. R. “On the numerical solution of an alloy solidification problem”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 22, pp. 941–947, 1979.

- [74] VOLLER, V. R. “A similarity solution for solidification of an under-cooled binary alloy”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 49, pp. 1981–1985, 2006.
- [75] RUBINSTEIN, L. “The Stefan Problem”. In: *Translations of Mathematical Monographs*, v. 27, *Monographs*, American Mathematical Society, Providence, Providence, Rhode Island, 1971.
- [76] CARSLAW, H., JAEGER, J. *Conduction of Heat in Solids*. 2 ed. Oxford, Oxford University Press, 1959.
- [77] HADAMARD, J. “Sur les problèmes aux dérivées partielles et leur signification physique”, *Princeton University Bulletin*, pp. 49–52, 1902.
- [78] BACKUS, G. E., GILBERT, J. F. “Numerical Applications of a Formalism for Geophysical Inverse Problems”, *Geophysical Journal of the Royal Astronomical Society*, v. 13, pp. 247–276, Julho 1967.
- [79] AMBARTSUMIAN, R. V. “A life in astrophysics. Selected papers of Viktor A. Ambartsumian”, *Astrophysics*, v. 41, n. 4, pp. 328–330, 1998.
- [80] TIKHONOV, A. N., ARSENIN, V. Y. *Solution of Ill-Posed Problems*. Winston & Sons, 1977.
- [81] BECK, J. V., ARNOLD, K. J. *Parameter estimation in engineering and science*. Australia, John Wiley & Sons, 1977.
- [82] BECK, J. V., BLACKWELL, B., CLAIR, C. R. S. *Inverse Heat Conduction*. John Wiley & Sons, 1985.
- [83] ÖZİŞİK, M. N., ORLANDE, H. R. B. *Inverse Heat Transfer: Fundamentals and Applications*. Taylor & Francis, 2000.
- [84] RISTIC, B., ARULAMPALAM, S., GORDON, N. *Beyond the Kalman Filter: Particle Filters for Tracking Applications*. Artech House Radar Library, 2004.
- [85] ORLANDE, H. R. B., COLAÇO, M. J., DULIKRAVICH, G. S. “Approximation of the likelihood function in the bayesian technique for the solution of inverse problems”, *Inverse Problems, Design and Optimization Symposium*, 2007.
- [86] VASWANI, N. “Particle Filters for Infinite (Or Large) Dimensional State Spaces - Part 2”, *IEEE Intl. Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP)*, v. 56, n. 10, pp. 4583–4597, 2008.

- [87] VASWANI, N. “Particle Filtering for Large-Dimensional State Spaces With Multimodal Observation Likelihoods”, *IEEE Transactions on Signal Processing*, v. 56, n. 10, pp. 4583–4597, 2008.
- [88] GORDON, N., SALMOND, D., SMITH, A. “Novel approach to nonlinear/nongaussian bayesian state estimation”, *IEE Proceedings-F (Radar and Signal Processing)*, v. 140, n. 2, pp. 107–113, 1993.
- [89] SCHN, T., GUSTAFSSON, F., NORDLUND, P. “Marginalized particle filters for nonlinear state-space models”, *IEEE Transactions on Signal Processing*, 2005.
- [90] COLAÇO, M. J., ORLANDE, H. R. B., SILVA, W. B. D., et al. “Application of Two Bayesian Filters to Estimate Unknown Heat Fluxes in a Natural Convection Problem”, *Journal of Heat Transfer*, v. 134, 2012.
- [91] SHARMA, A., TYAGI, V., CHEN, C., et al. “Review on thermal energy storage with phase change materials and applications”, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 13, n. 2, pp. 318–345, 2009.
- [92] KITTL, J. A., REITANO, R., AZIZ, M. J., et al. “Time-resolved temperature measurements during rapid solidification of Si-As alloys induced by pulsed-laser melting”, *Journal of Applied Physics*, v. 73, n. 8, pp. 3725–3733, 1993.
- [93] QUEHEILLALT, D. T., LU, Y., WADLEY, H. N. G. “Laser ultrasonic studies of solid–liquid interfaces”, *The Journal of the Acoustical Society of America*, v. 101, n. 2, pp. 843–853, 1997.
- [94] KAKIMOTO, K., EGUCHI, M., WATANABE, H., et al. “In-situ observation of solid-liquid interface shape by X-ray radiography during silicon single crystal growth”, *Journal of Crystal Growth*, v. 91, n. 4, pp. 509–514, 1988.
- [95] PARKER, R. L., MANNING, J. R., PETERSON, N. C. “Application of pulse-echo ultrasonics to locate the solid/liquid interface during solidification and melting of steel and other metals”, *Journal of Applied Physics*, v. 58, n. 11, pp. 4150–4164, 1985.
- [96] BURHAN, D., IHARA, I., SEDA, Y. “In Situ Observations of Solidification and Melting of Aluminum Alloy Using Ultrasonic Waveguide Sensor”, *MATERIALS TRANSACTIONS*, v. 46, n. 9, pp. 2107–2113, 2005.

- [97] SILVA, W., ORLANDE, H., COLAÇO, M., et al. “Application of Bayesian Filters to a One-dimensional Solidification Problem”. In: *21st Brazilian Congress of Mechanical Engineering*, Natal, 2011.
- [98] MAROIS, M. A., DÉSILETS, M., LACROIX, M. “Prediction of a 2-D Solidification Front in High Temperature Furnaces by an Inverse Analysis”, *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, v. 59, n. 3, pp. 151–166, 2011.
- [99] JACCOUD, B., ORLANDE, H., FUDYM, O., et al. “State Estimation in Rubinstein’s Phase Change Problem”. In: *4th Conference of Computational Interdisciplinary Science*, São José dos Campos, 2016.
- [100] CHARIFI, M., ZEGADI, R. “Inverse Method for Controlling Pure Material Solidification in Spherical Geometry”, *Strojniški vestnik - Journal of Mechanical Engineering*, v. 63, n. 2, pp. 103–110, 2017.
- [101] HUTTUNEN, J. *Approximation and Modelling Errors in Nonstationary Inverse Problems*. Tese de Doutorado, Faculty of Natural and Environmental Sciences, 2008.
- [102] PACHECO, C. C., ORLANDE, H. R. B., COLAÇO, M. J., et al. “Estimation of a Location- and Time-Dependent High-Magnitude Heat Flux in a Heat Conduction Problem Using the Kalman Filter and the Approximation Error Model”, *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, v. 68, n. 11, pp. 1198–1219, 2015.
- [103] ORLANDE, H. R. B., DULIKRAVICH, G. S., NEUMAYER, M., et al. “Accelerated Bayesian Inference for the Estimation of Spatially Varying Heat Flux in a Heat Conduction Problem”, *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, v. 65, n. 1, pp. 1–25, 2014.
- [104] LAMIEN, B., BARRETO ORLANDE, H. R., ENRIQUE ELIÇABE, G. “Particle Filter and Approximation Error Model for State Estimation in Hyperthermia”, *Journal of Heat Transfer*, v. 139, n. 1, pp. 012001, 2016.
- [105] PEARSON, K. “LIII. On lines and planes of closest fit to systems of points in space”, *Philosophical Magazine Series 6*, v. 2, n. 11, pp. 559–572, 1901.
- [106] OSTROWSKI, Z., BIAŁECKI, R. A., KASSAB, A. J. “Advances in Application of Proper Orthogonal Decomposition in Inverse Problems”. In: *5th International Conference on Inverse Problems in Engineering: Theory and Practice*, Cambridge, UK, 2005.

- [107] KIRBY, M., SIROVICH, L. “Application of the Karhunen-Loeve procedure for the characterization of human faces”, *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, v. 12, n. 1, pp. 103–108, 1990.
- [108] LY, H. V., TRAN, H. T. “Modeling and control of physical processes using proper orthogonal decomposition”, *Mathematical and Computer Modelling*, v. 33, n. 1-3, pp. 223–236, 2001.
- [109] ATWELL, J., KING, B. “Proper orthogonal decomposition for reduced basis feedback controllers for parabolic equations”, *Mathematical and Computer Modelling*, v. 33, n. 1-3, pp. 1–19, 2001.
- [110] BIAŁECKI, R. A., KASSAB, A. J., OSTROWSKI, Z. “Application of the Proper Orthogonal Decomposition in Steady State Inverse Problems”. In: *Inverse Problems in Engineering Mechanics IV*, Elsevier, pp. 3–12, Nagano, Japan, 2003.
- [111] SHENEFELT, J., LUCK, R., TAYLOR, R., et al. “Solution to inverse heat conduction problems employing singular value decomposition and model-reduction”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 45, n. 1, pp. 67–74, 2002.
- [112] LIANG, Y., LEE, H., LIM, S., et al. “Proper Orthogonal Decomposition and its Applications-Part I: Theory”, *Journal of Sound and Vibration*, v. 252, n. 3, pp. 527–544, 2002.
- [113] OSTROWSKI, Z., BIAŁECKI, R. A., KASSAB, A. J. “Solving inverse heat conduction problems using trained POD-RBF network inverse method”, *Inverse Problems in Science and Engineering*, v. 16, n. 1, pp. 39–54, 2008.
- [114] OSTROWSKI, Z., BIAŁECKI, R. A., KASSAB, A. J. “Estimation of constant thermal conductivity by use of Proper Orthogonal Decomposition”, *Computational Mechanics*, v. 37, n. 1, pp. 52–59, 2005.
- [115] ROGERS, C. A., KASSAB, A. J., DIVO, E. A., et al. “An inverse POD-RBF network approach to parameter estimation in mechanics”, *Inverse Problems in Science and Engineering*, v. 20, n. 5, pp. 749–767, 2012.
- [116] PEPPIN, S. S. L., ELLIOTT, J. A. W., WORSTER, M. G. “Solidification of colloidal suspensions”, *Journal of Fluid Mechanics*, v. 554, pp. 147–166, 2006.
- [117] CRANK, J. *Free and Moving Boundary Problems*. Oxford science publications. Oxford, Clarendon Press, 1984.

- [118] SPARROW, E. M., PATANKAR, S. V., RAMADHYANI, S. “Analysis of Melting in the Presence of Natural Convection in the Melt Region”, *Journal of Heat Transfer*, v. 99, pp. 520–526, 1977.
- [119] PATANKAR, S. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Nova York, Taylor & Francis, 1980.
- [120] MALISKA, C. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. 2 ed. Rio de Janeiro, LTC, 2004.
- [121] COLAÇO, M. J., DULIKRAVICH, G. S., MARTIN, T. J. “Control of unsteady solidification via optimized magnetic fields”, *Materials and Manufacturing Processes*, v. 20, pp. 1–25, 2005.
- [122] ZABARAS, N., SAMANTA, D. A. “A stabilized volume-averaging finite element method for flow in porous media and binary alloy solidification processes”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 60, pp. 1103–1138, 2004.
- [123] MICHAEL, S. D. *Science and Engineering of Casting Solidification, Second Edition*. Boston, MA, Springer US, 2009.
- [124] COLAÇO, M. J. *Problemas Inversos de Convecção em geometrias irregulares*. Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, 2001.
- [125] ARULAMPALAM, M. S., MASKELL, S., GORDON, N., et al. “A tutorial on particle filters for o-line non- linear/non-Gaussian Bayesian tracking”, *IEEE Transactions on Signal Processin*, v. 50, n. 2, pp. 174–188, 2002.
- [126] DOUCET, A., FREITAS, N., GORDON, N. *Sequential Monte Carlo Methods In Practice*. New York, USA, Springer, 2001.
- [127] HAMMERSLEY, J. M., HANSCOMB, D. C. *Monte Carlo Methods*. London: Chapman & Hall, 1964.
- [128] ORLANDE, H. R. B., COLAÇO, M. J., DULIKRAVICH, G. S. “Application of bayesian filters to heat conduction problem”. In: *International Conference on Engineering Optimization*, Rio de Janeiro, Brazil, 2008.
- [129] BERGMAN, N. *Recursive Bayesian estimation: Navigation and tracking applications*. Tese de Doutorado, Linköping Studies in Science and Technology, 1999.

- [130] LIU, J. S., CHEN, R. “Sequential Monte Carlo Methods for Dynamic Systems”, *Journal of the American Statistical Association*, v. 93, n. 443, pp. 1032–1044, 1998.
- [131] KONG, A., LIU, J. S., WONG, W. H. “Sequential imputations and Bayesian missing data problems”, *Journal of the American statistical association*, v. 89, n. 425, pp. 278–288, 1994.
- [132] PITT, M. K., SHEPHARD, N. “Filtering via Simulation: Auxiliary Particle Filters”, *Journal of the American Statistical Association*, v. 94, n. 446, pp. 590–599, June 1999.
- [133] SÄRKKA, S. *Bayesian Filtering and Smoothing*. Cambridge University Press, 2013.
- [134] WEST, M. “Approximating Posterior Distributions by Mixture”, *Journal of the Royal Statistical Society B*, v. 55, n. 2, pp. 409–422, 1993.
- [135] RIOS, M. P., LOPES, H. F. *State-Space Models*. New York, USA, Springer, 2013.
- [136] ARRIDGE, S. R., KAPIO, J. P., KOLEHMAINEN, V., et al. “Approximation errors and model reduction with an application in optical diffusion tomography”, *Inverse Problems*, v. 22, n. 1, pp. 175–195, 2006.
- [137] HUTTUNEN, J., KAPIO, J. P. “Approximation errors in nonstationary inverse problems”, *Inverse Problems and Imaging*, v. 1, n. 1, pp. 77–93, 2007.
- [138] HUTTUNEN, J., KAPIO, J. P. “Approximation error analysis in nonlinear state estimation with an application to state-space identification”, *Inverse Problems*, v. 23, n. 5, pp. 2141, 2007.
- [139] HUTTUNEN, J., KAPIO, J. P. “Model reduction in state identification problems with an application to determination of thermal parameters”, *Applied Numerical Mathematics*, v. 59, n. 5, pp. 877–890, 2009.
- [140] BULJAK, V. *Inverse Analyses with Model Reduction: Proper Orthogonal Decomposition in Structural Mechanics*. Computational Fluid and Solid Mechanics. 1 ed. Berlin, Springer Publishing Company, Incorporated, 2011.
- [141] OSTROWSKI, Z. *Application of Proper Orthogonal Decomposition to the Solution of the Inverse Problem*. Tese de Doutorado, Faculty of Energy and Environmental Engineering, 2006.



- [142] GOLUB, G. H., VAN LOAN, C. F. *Matrix Computations*. 3 ed. Baltimore, MD, USA, Johns Hopkins University Press, 1993.
- [143] STRANG, G. *Linear Algebra and Its Applications*. 4 ed. Belmont, CA, Thomson, Brooks/Cole, 2006.
- [144] BERKOOZ, G., HOLMES, P., LUMLEY, J. L. “The Proper Orthogonal Decomposition in the Analysis of Turbulent Flows”, *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 25, n. 1, pp. 539–575, 1993.
- [145] HOLMES, P., LUMLEY, J. L., BERKOOZ, G. “Proper orthogonal decomposition”. In: *Turbulence, Coherent Structures, Dynamical Systems and Symmetry*, Cambridge University Press, pp. 86–128, Cambridge, 1996.
- [146] COLAÇO, M. J., DULIKRAVICH, G. S., SAHOO, D. “A response surface method-based hybrid optimizer”, *Inverse Problems in Science and Engineering*, v. 16, n. 6, pp. 717–741, 2008.
- [147] COLAÇO, M. J., SILVA, W. B., MAGALHÃES, A. C., et al. “Response Surface Methods Applied to Scarce and Small Sets of Training Points – A Comparative Study”. In: *EngOpt 2008 - International Conference on Engineering Optimization*, Rio de Janeiro, 2008.
- [148] COLAÇO, M. J., DULIKRAVICH, G. S. “A Survey of Basic Deterministic, Heuristic and Hybrid Methods for Single Objective Optimization and Response Surface Generation”. In: *Thermal Measurements and Inverse Techniques*, cap. 10, pp. 355–401, New York, CRC Press, 2011.
- [149] MILLER, F. M., COLAÇO, M. J. “Concentrating Linear Fresnel Reflector Working with Supercritical CO<sub>2</sub> Power Cycles”. In: *11th Conference on Sustainable Development of Energy, Water and Environment Systems*, Lisbon, 2016.
- [150] TORRESOLA, J. *Solidification Properties of certain Waxes and Paraffins*. Tese de Doutorado, B.S.M.E. Massachusetts Institute of Technology, 1996.
- [151] KHANAFER, K., VAFAI, K. “A critical synthesis of thermophysical characteristics of nanofluids”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 54, n. 19-20, pp. 4410–4428, 2011.
- [152] CELIK, I., KARATEKIN, O. “Numerical Experiments on Application of Richardson Extrapolation With Nonuniform Grids”, *Journal of Fluids Engineering*, v. 119, n. 3, pp. 584, 1997.

- [153] ANDERSON, E., BAI, Z., BISCHOF, C., et al. *LAPACK Users' Guide*. 3th ed. Philadelphia, PA, Society for Industrial and Applied Mathematics, 1999.

# Apêndice A

## Linhas de Corrente

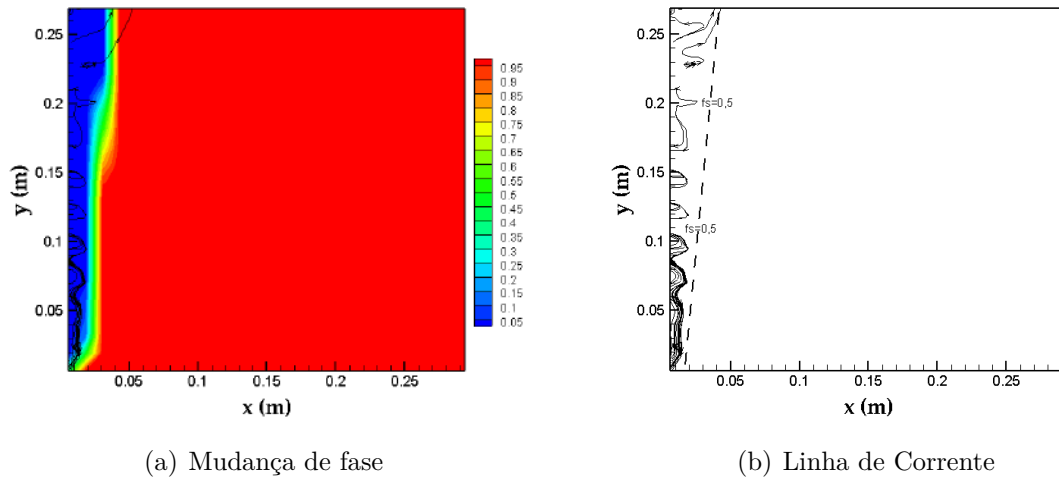


Figura A.1: Mudança de Fase e linhas de corrente em  $t = 5h$ .

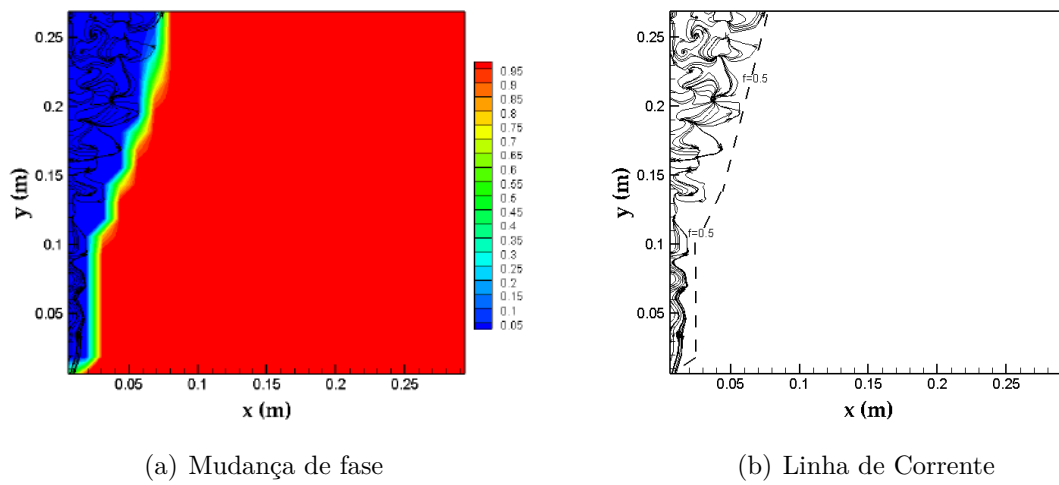
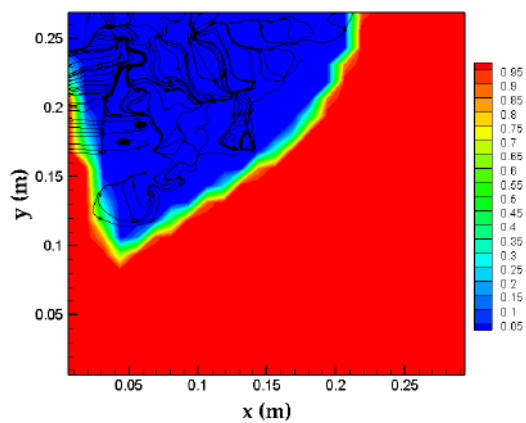
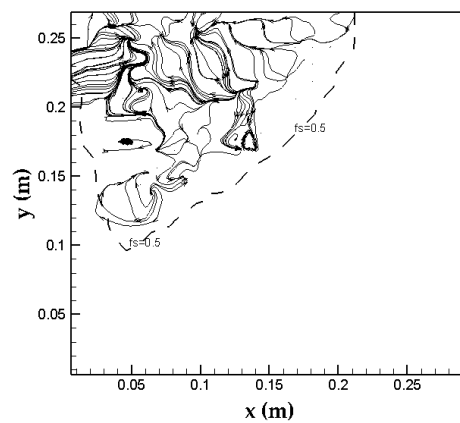


Figura A.2: Mudança de Fase e linhas de corrente em  $t = 7h$ .

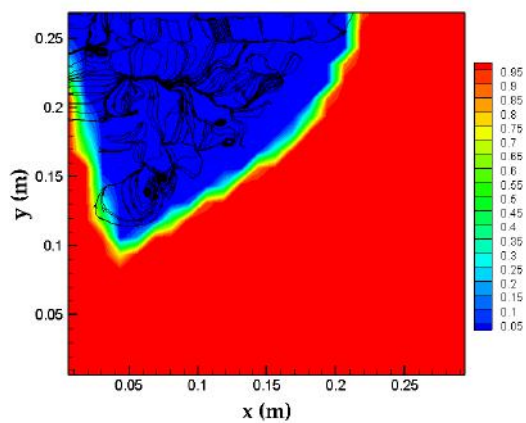


(a) Mudança de fase

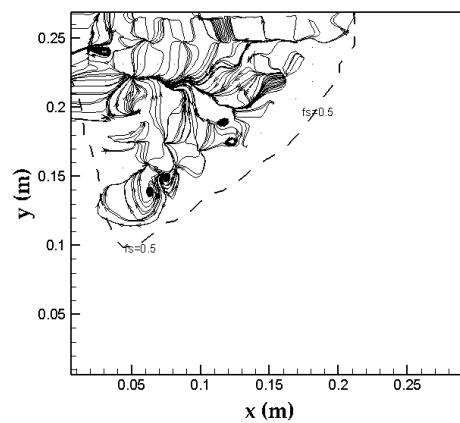


(b) Linha de Corrente

Figura A.3: Mudança de Fase e linhas de corrente em  $t = 16h$ .



(a) Mudança de fase



(b) Linha de Corrente

Figura A.4: Mudança de Fase e linhas de corrente em  $t = 24h$ .